

Paulo Bastos de Castro

**MODELO DE DANO DÚCTIL-HIDROLÍTICO ACOPLADO
PARA MATERIAIS ELASTO-VISCOPLÁSTICOS BASEADO EM
ATUALIZAÇÕES CONSTITUTIVAS VARIACIONAIS**

Tese submetida ao Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da
Universidade Federal de Santa Catarina
como parte dos requisitos para a
obtenção do Título de
Doutor em Engenharia Mecânica.
Orientador:
Prof. D.Sc. Eduardo Alberto Fancello

Florianópolis

2017

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Castro, Paulo Bastos de
Modelo de dano dúctil-hidrolítico acoplado para
materiais elasto-viscoplásticos baseado em
atualizações constitutivas variacionais / Paulo
Bastos de Castro ; orientador, Eduardo Alberto
Fancello - Florianópolis, SC, 2017.
150 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós
Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2017.

Inclui referências.

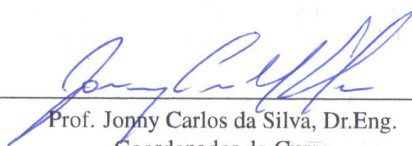
1. Engenharia Mecânica. 2. dano dúctil e
hidrolítico acoplados. 3. atualizações constitutivas
variacionais. 4. polímeros bioabsorvíveis. 5. análise
de elementos finitos. I. Fancello, Eduardo
Alberto. II. Universidade Federal de Santa
Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Mecânica. III. Título.

Paulo Bastos de Castro

**MODELO DE DANO DÚCTIL-HIDROLÍTICO ACOPLADO
PARA MATERIAIS ELASTO-VISCOPLÁSTICOS BASEADO EM
ATUALIZAÇÕES CONSTITUTIVAS VARIACIONAIS**

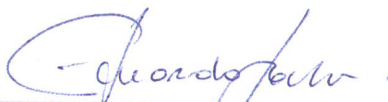
Esta Tese foi julgada adequada para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica, Área de concentração Análise & Projeto Mecânico, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, 30 de março de 2017

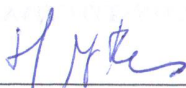


Prof. Jonny Carlos da Silva, Dr.Eng.
Coordenador do Curso

Banca Examinadora:



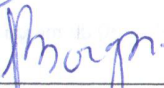
Prof. Eduardo Alberto Fancello, D.Sc.
Presidente - Orientador
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Heraldo Silva da Costa Mattos, Dr.Eng.
Relator
Universidade Federal Fluminense



Prof. Miguel Vaz Júnior, Ph.D
Universidade do Estado de Santa Catarina



Profª. Lavinia Maria Sanabro Alves Borges, D.Sc.
Universidade Federal do Rio de Janeiro



Prof. Jakson Manfredini Vassoler, Dott.Ric.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul



Prof. Gean Vitor Salmoria, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina

Aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

Inicialmente gostaria de agradecer ao Prof. Eduardo Alberto Fancello por sua orientação, inestimável contribuição a minha formação pessoal, acadêmica e profissional.

Agradeço aos professores Heraldo Silva da Costa Mattos, Lavinia Maria Sanabio Alves Borges, Miguel Vaz Júnior, Jakson Manfredini Vassoler e Gean Vitor Salmoria por aceitarem participar da banca examinadora desta tese e por suas valiosas observações, correções e sugestões.

Sou grato a todos do Departamento de Engenharia Mecânica e do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (POSMEC) que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho, em especial, aos professores do Grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE).

Devo agradecimentos também a Jan-Michel Farias e Thiago Carniel por disponibilizarem o código de elementos finitos CEOS.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro concedido por meio de bolsa de estudos.

Finalmente, eu gostaria de agradecer aos meus colegas de laboratório pela amizade, pelo conhecimento compartilhado e pelo convívio dos últimos anos.

RESUMO

Motivada pelo crescente uso de materiais poliméricos bioabsorvíveis no projeto e fabricação de implantes de uso médico (âncoras de sutura, parafusos de interferência, pinos, suportes, *stents*), a presente tese tem como objetivo propor um modelo constitutivo capaz de representar a resposta mecânica de materiais que, quando submetidos a solicitações mecânicas e químicas, apresentam comportamento resultante do acoplamento de deformações elasto-viscoplásticas, dano dúctil e dano decorrente de degradação química (hidrólise). O modelo foi formulado em um contexto de cinemática não linear, de maneira a permitir simulações que consideram deslocamentos e deformações finitas condizentes com a baixa rigidez dos materiais poliméricos. O modelo proposto é sustentado por uma base teórica termodinamicamente consistente e utiliza variáveis internas para tratamento dos fenômenos dissipativos. A atualização temporal das variáveis internas segue princípios variacionais relacionados a caminhos de extremização de funções potenciais. O algoritmo de atualização resultante possui uma estrutura operacional simples que confere robustez ao procedimento. O modelo foi implementado numericamente em um código de elementos finitos acadêmico bem como em um programa comercial (ABAQUS/UMAT), viabilizando assim a simulação de geometrias e condições de carregamento complexas. Vários testes numéricos que reproduzem situações típicas de aplicação foram executados e discutidos, permitindo comprovar a eficácia do modelo proposto em acoplar os fenômenos citados e possibilitando estimar a resposta de dispositivos submetidos simultaneamente a solicitações mecânicas e químicas. Assim, comprova-se o real potencial da formulação proposta no auxílio ao desenvolvimento e verificação de projetos de novos produtos.

Palavras-chave: atualização constitutiva variacional, viscoplasticidade, dano plástico, degradação hidrolítica, polímeros, materiais bioabsorvíveis, análise de elementos finitos.

ABSTRACT

Having been motivated by the increasing use of bioabsorbable materials for the design and production of medical devices (suture anchors, interference screws, pins, scaffolds, stents), this thesis aims at proposing a constitutive model capable of representing the mechanical behavior of materials that, once subjected to mechanical and chemical loading conditions, respond by means of coupling effects between elastic-viscoplastic deformation, ductile damage and chemical (hydrolytic) degradation. The model is formulated in the context of nonlinear kinematics allowing for finite deformations associated with polymeric materials. The formulation is grounded on a consistent thermodynamic theory and makes use of internal variables in order to deal with dissipative phenomena. The incremental update of internal variables follows variational principles related to the extremization of potential functions. The update-algorithm has a simple operational scheme, resulting in a robust computational procedure. The model was implemented into an in-house finite-element academic code as well as into a commercial software (ABAQUS/UMAT), making possible the simulation of complex geometric and loading conditions. Several numerical tests reproducing aspects of typical applications were performed and the results reported are then discussed. By doing so, the effectiveness of such a proposal in representing the above-mentioned coupling effects and its real potential to support the development and verification of new products are attested.

Keywords: variational constitutive updates, viscoplasticity, plastic damage, hydrolytic degradation, polymers, bioabsorbable materials, finite element analysis.

LISTA DE FIGURAS

3.1	Representação da molécula de etileno (esquerda), mero ou unidade de repetição (centro) e molécula de polietileno (direita).	43
3.2	Estruturas típicas das cadeias poliméricas: (a) linear, (b) ramificada, (c) ligações cruzadas, (d) em rede. Adaptado de Callister (2007).	44
3.3	Organização lamelar das moléculas de um polímero (esquerda superior). Empacotamento dos átomos das cadeias poliméricas de polietileno (esquerda inferior). Estrutura de um esferulito (centro). Cadeias de um material amorfo (direita superior). Imagem de microscopia ótica do material polihidroxibutirato (PHB). Figuras adaptadas de Callister (2007) e imagem microscópica obtida de DoITPoMS.	46
3.4	Variação de propriedades em relação à temperatura de transição vítrea T_g e à temperatura de fusão T_m .	47
3.5	Curvas de tensão vs. deformação para diferentes tipos de materiais: frágil (A), dúctil (B), borrachoso (C). Adaptado de Callister (2007).	49
3.6	Comportamento à tração para vários materiais à temperatura de 25°C e uma taxa de deformação de 10^{-4} s^{-1} . Adaptado de GSell et al. (1992)	49
3.7	Influência da temperatura nas curva de tensão-deformação para PEAD e PC. Adaptado de GSell et al. (1992).	50
3.8	Efeitos da taxa de deformação nas curvas de tensão-deformação. Materiais PEAD e PC. Adaptado de GSell et al. (1992)	51
3.9	Representação esquemática dos fenômenos viscosos de relaxação, fluência e recuperação.	52
3.10	Comportamento mecânico (tração vs. deformação reais) de materiais (a) amorfos e (b) semicristalinos. Adaptado de Duan et al. (2001).	53
3.11	Comportamento esquemático da relação tensão-deformação de um polímero, bem como um exemplo do fenômeno de estricção e sua propagação em um corpo de prova.	54

3.12	Ilustração de um microfissuramento em polímeros e a subsequente formação de uma trinca. Adaptado de Callister (2007), Brown e Lu (2000).	55
3.13	Aplicações médicas e ecológicas dos materiais biodegradáveis. Adaptado de Ikada e Tsuji (2000).	56
3.14	Função éster. Enantiômeros do ácido láctico: L- e D- ácido lácticos.	57
3.15	Algumas variações da relação entre o módulo de elasticidade normalizado e o peso molecular normalizado (\bar{M}_n). Adaptado de Gleadall (2015).	59
3.16	Sequência da evolução das propriedades. Adaptado de Pietrzak, Sarver e Verstynen (1997).	61
3.17	Sequência de degradação do material. (a) Degradação superficial, (b) degradação mássica interior, (c) degradação mássica (homogênea).	62
3.18	Definição de área efetiva. Área sem dano (A_0) e área com danificação (A).	64
3.19	Exemplo de aplicação da MDC. Comparação do campo de dano estimado computacionalmente com o modelo de Lemaitre e a ocorrência de trinca observada em experimento (CASTRO, 2012).	66
5.1	Influência da taxa de deformação e do dano dúctil nas curvas de tensão-deformação.	89
5.2	Dano plástico vs. deformação logarítmica total para três taxas de deformação.	90
5.3	Curvas de relaxação para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico. Respostas relativas aos primeiros 40 s do ensaio.	91
5.4	Influência da degradação hidrolítica nas curvas de relaxação para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.	91
5.5	Evolução do dano plástico para os primeiros 40 s considerando diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.	92
5.6	Evolução do dano hidrolítico para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.	93
5.7	Evolução do dano total para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.	93
5.8	Influência dos efeitos de dano na evolução da deformação logarítmica para uma carga constante de 112 N.	94

5.9	Influência dos efeitos de dano na evolução da tensão para uma carga constante de 112 N.....	94
5.10	Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ nas curvas de tensão para o teste de relaxação.	96
5.11	Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ na solução do dano hidrolítico para o teste de relaxação.	96
5.12	Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ nas curvas de tensão para o testes com taxas de deformação consideravelmente baixas ($\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$).	97
5.13	Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ na solução do dano hidrolítico em testes de tração a taxas de deformação consideravelmente baixas ($\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$).	98
5.14	Avaliação da convergência para tensão em relação ao incremento de tempo Δt . Estudo 1, para taxas de deformação baixas ($\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$) com erro avaliado em $t = 6,7 \times 10^6 \text{ s}$. Estudo 2, para os testes de relaxação a partir do estado inicial de tensão 186 MPa e $d = 0,318$, com erro avaliado em $t = 5 \times 10^6 \text{ s}$ Tempo total do ensaio $t = 10 \times 10^6 \text{ s}$ e parâmetros $\theta = 1$ e $\gamma = 1$ para ambos os casos.	99
5.15	Modelo de uma barra circular com entalhe central.	100
5.16	Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Evolução (a) da tensão de von Mises [MPa] e dos danos (b) plástico e (c) hidrolítico	102
5.17	Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Evolução do campo de dano total.	102
5.18	Distribuição de dano hidrolítico e dúctil ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.	103
5.19	Distribuição de dano total ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.	103
5.20	Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Estágio inicial de relaxação.	104
5.21	Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Estágio final de relaxação. Diferenças de respostas entre um material sob efeito de degradação e outro que não está.	104
5.22	Teste de fluência em uma barra circular com entalhe central. Evolução (a) da tensão de von Mises [MPa] e dos danos (b) plástico e (c) hidrolítico.	106
5.23	Teste de fluência em uma barra circular com entalhe central. Evolução do dano total.	106

5.24	Distribuição de dano hidrolítico e dúctil ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.	107
5.25	Distribuição do dano total ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.	107
5.26	Resposta do tipo fluência para um material sob degradação hidrolítica. Avaliação do estágio inicial do ensaio (40 s).	108
5.27	Resposta do tipo fluência para um material sob degradação hidrolítica. Avaliação do estágio final do ensaio. Resultado comparativo entre um material que está sob efeito de degradação hidrolítica e outro que não está.	108
5.28	Ajuste de curvas dos dados experimentais publicados em Soares (2008) para o material PLLA. Teste de tração para os materiais não degradados e degradados. Teste realizado para uma taxa de deformação de engenharia de 5%/min.	110
5.29	Ajuste de curvas dos dados experimentais publicados em Soares (2008) para o material PLLA. Teste de relaxação para os materiais não degradados e degradados.	111
5.30	Geometria e modelo de elementos finitos de uma âncora de sutura.	113
5.31	Tensão de von Mises [MPa] em uma âncora de sutura para um teste do tipo fluência.	113
5.32	Estado final de danificação (8×10^6 s, ~ 92 dias) para um teste do tipo fluência em uma âncora de sutura.	114
5.33	Tensão hidrostática [MPa] em uma âncora de sutura para um teste do tipo fluência.	114
5.34	Deslocamento vs. tempo medidos para a âncora em relação ao ponto de referência para os casos de um componente que sofre degradação e outro que não está sob o efeito de degradação.	115

LISTA DE TABELAS

2.1	Quadro resumo para modelos de degradação selecionados (1).	34
2.2	Quadro resumo para modelos de degradação selecionados (2).	35
2.3	Quadro resumo. Aplicação dos modelos de atualização vari- acional.	41
4.1	Estrutura algorítmica proposta.	85
5.1	Propriedades constitutivas de um material hipotético.....	88
5.2	Parâmetros de integração.....	95
5.3	Parâmetros constitutivos identificados a partir dos dados de Soares (2008).	111

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área danificada, i.e. área com vazios
A_0	Área original sem vazios
\mathbf{b}	Força de corpo (força por unidade de volume)
\mathcal{B}	Corpo em um espaço euclidiano
c	Constante viscoplástica (viscosidade, 1/s)
\mathbf{C}	Tensor de deformação de Cauchy-Green à direita
\mathbf{C}^e	Tensor de deformação elástica de Cauchy-Green à direita
d	Variável total de dano
d^h	Variável dano hidrolítico
d^p	Variável dano plástico dúctil
\mathbf{D}	Tensor taxa de deformação
\mathbf{D}^p	Tensor taxa de deformação plástica
\mathcal{E}	Conjunto de variáveis de estado
\mathbf{F}	Tensor gradiente de deformação
\mathbf{F}^p	Tensor gradiente de defoemação plástico
g	Constante de dano hidrolítico
h	Módulo da função de saturação
H	Módulo de encruamento isotrópico
\mathbf{I}	Tensor identidade de segunda ordem
\mathbb{I}_S	Tensor identidade simétrico de quarta ordem ordem
J	Determinante do jacobiano
k	Módulo de encruamento linear isotrópico
k_v	Constante da função de saturação
K	Módulo volumétrico
\mathbf{L}	Tensor gradiente de velocidade
\mathbf{L}^p	Tensor gradiente de velocidade plástica
m	Expoente de dano hidrolítico
\mathbf{M}	Tensor de direção
n	Expoente de encruamento isotrópico
n	Expoente de sensibilidade ao dano
N	Constante de dano dúctil
\mathbf{n}	Vetor unitário normal à superfície
\mathbf{P}	Primeiro Piola-Kirchhoff

\mathcal{P}	Pseudo-potencial de dissipação
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor
\mathbf{Q}	Forças termodinâmicas conjugadas dissipativas
r	Calor produzido localmente
R	Constante de dano hidrolítico
s	Entropia
S	Expoente de dano dúctil
\mathbf{S}	Segundo Piola-Kirchhoff
T	Temperatura absoluta
T_g	Temperatura de transição vítrea
T_m	Temperatura de fusão
\mathbf{t}	Vetor força por unidade de área (vetor trativo)
u	Energia interna
U	Energia livre elástica volumétrica
\mathbf{u}	Vetor deslocamento
W	Energia livre de Helmholtz
W^e	Energia livre elástica isocórica
W^p	Energia livre plástica isocórica
\mathbf{W}^p	Tensor de vorticidade plástico
\mathcal{W}	Pseudo-potencial de dissipação incremental
$\tilde{\mathcal{W}}$	Pseudo-potencial reduzido incremental
Y, Y^d, Y^h	Forças termodinâmicas conjugadas a d , d^p , d^h
\mathbf{Z}	Variáveis internas dissipativas

Símbolos gregos

α	Variável interna (medida de deformação acumulada)
γ	Parâmetro de integração
Γ	Contorno regular
$\Delta\alpha$	Variável incremental de deformação acumulada
Δd^h	Variável incremental de dano hidrolítico
Δd^p	Variável incremental de dano plástico dúctil
Δt	incremento de tempo
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tensor de deformações logarítmica
η	Expoente viscoplástico (sensibilidade à taxa)
θ	Parâmetro de integração
λ	Multiplicadores de Lagrange
μ	Módulo de cisalhamento
ρ	massa específica
σ	Tensão real escalar
$\tilde{\sigma}$	Tensão efetiva escalar

σ	Tensor de tensões de Cauchy
σ_Y	Tensão de escoamento
Σ	Tensor de tensões de Mandel
ϕ^*	Pseudo-potencial de dissipação
φ_{dh}^*	Pseudo-potencial de dissipação de dano hidrolítico
φ_{dp}^*	Pseudo-potencial de dissipação de dano plástico
ψ_{vp}^*	Pseudo-potencial de dissipação viscoplástica
Ω	Região aberta do espaço euclidiano
Operadores etc	
$\text{dev}(\bullet)$	Operador desviador
\mathbb{P}	Operador projeção isocórico material
$\nabla \cdot (\bullet)$	Operador divergência
$(\bullet)^{pr}$	Indica um valor preditor
$(\hat{\bullet})$	Indica um valor isocórico

LISTA DE SIGLAS

PA	Poliamida
PA6	Poliamida 6
PAA	Poli(ácido anidrido)
PBS	Poli(butileno succinato)
PC	Policarbonato
PCA	Poli(α -cianocrilato
PCL	Policaprolactona
PDLA	Poli(D-ácido láctico)
PDLLA	Poli(D,L-ácido láctico)
PE	Polietileno
PEA	Poliesteramida
PEAD, HDPE	Polietileno de alta densidade
PEBD, LDPE	Polietileno de baixa densidade
PEC	Clorinado de polietileno
PEEK	Polieteretercetona
PES	Polietersulfona
PGA	Poli(ácido glicólico)
PGALA	Poli(ácido glicólico- <i>co</i> -láctico)
PHA	Polihidroxialcanoato
PHB	Polihidroxibutirato
PLA	Poli(ácido láctico)
PLLA	Poli(L-ácido láctico)
PMMA	Polimetil metacrilato
POE	Poliortoéster
PP	Polipropileno
PTFE	Politetrafluoretileno
PVC	Policloreto de vinila

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	MOTIVAÇÃO E CONTEXTO	27
1.2	OBJETIVOS	29
1.3	CONTRIBUIÇÕES DA TESE	29
1.4	ESTRUTURA DO DOCUMENTO	30
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	31
2.1	MODELOS DE DEGRADAÇÃO	31
2.2	MODELOS DE ATUALIZAÇÃO VARIACIONAL	36
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	43
3.1	MATERIAIS POLIMÉRICOS, POLÍMEROS BIOABSORVÍVEIS E HIDRÓLISE	43
3.1.1	Materiais poliméricos	43
3.1.2	Polímeros bioabsorvíveis e hidrólise	55
3.1.2.1	Hidrólise	56
3.1.2.2	Materiais bioabsorvíveis	57
3.2	MECÂNICA DO DANO CONTÍNUO	63
3.3	TERMOMECÂNICA DO CONTÍNUO	67
3.4	FORMULAÇÃO VARIACIONAL	70
4	FORMULAÇÃO DO MODELO DE DANO DÚCTIL-HIDROLÍTICO	73
4.1	FORMULAÇÃO PARA O CONTÍNUO	74
4.2	FORMULAÇÃO INCREMENTAL	79
4.3	OPERADOR TANGENTE CONSISTENTE	83
4.4	ALGORITMO	83
5	EXEMPLOS E RESULTADOS	87
5.1	TESTES DE RELAXAÇÃO E DE FLUÊNCIA UNIAXIAL	89
5.2	ANÁLISE DO ESQUEMA DA DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL	95
5.3	TESTES EM BARRA CIRCULAR COM ENTALHE	100
5.3.1	Testes de relaxação	101
5.3.2	Teste de fluência	105
5.4	TESTES EM UMA ÂNCORA DE SUTURA	109
5.4.1	Identificação de novos parâmetros constitutivos	109
5.4.2	Simulação da âncora de sutura	112

6	CONCLUSÃO	117
6.1	TRABALHOS FUTUROS	118
	Apêndice A – Potencial incremental	133
	Apêndice B – Estacionariedade: direção	135
	Apêndice C – Estacionariedade: deformação acumulada	139
	Apêndice D – Estacionariedade: dano hidrolítico	141
	Apêndice E – Segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff	143
	Apêndice F – Segunda derivada do potencial incremental	145

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO E CONTEXTO

Todos os materiais empregados em engenharia, em maior ou menor grau, estão sujeitos a processos de degradação, sejam de natureza física (dano mecânico, radiação etc) ou química (corrosão, oxidação, hidrólise etc). Em geral, é desejável que tais processos possam ser previstos para que se garanta a integridade estrutural de produtos e componentes, ou ainda, com a finalidade de se determinar o tempo de vida útil dos mesmos.

Como exemplo, processos de degradação controlada formam parte do projeto de implantes médicos, nos quais se empregam materiais biorreabsorvíveis/bioabsorvíveis ¹ (fios de sutura; parafusos, âncoras e pinos ortopédicos; *stents*). Assim sendo, passa a ser cada vez mais importante, do ponto de vista científico e tecnológico, a formulação e o desenvolvimento de modelos capazes de representar tais processos de degradação. Observa-se que tal demanda é particularmente relevante em um contexto nacional, no qual o desenvolvimento de produtos médicos baseados na tecnologia de materiais bioabsorvíveis se encontra em franca expansão ².

Materiais poliméricos são amplamente empregados na engenharia devido a sua versatilidade e propriedades mecânicas. Cada vez mais, são utilizados em substituição aos metais e às cerâmicas, sendo encontrados em diversas aplicações nas indústrias automotiva, aeroespacial, de bens de consumo em geral, assim como na medicina (equipamentos, insumos, implantes). Por isso,

¹Para que se possa manter clareza e entendimento ao longo de todo o texto, inicialmente são feitas algumas observações relacionadas à terminologia empregada. Segundo Vert et al. (1992 apud BARBANTI; ZAVAGLIA; DUEK, 2005), os termos biodegradável, biorreabsorvível e bioabsorvível são definidos como segue. Biodegradável é a definição para os polímeros e componentes poliméricos que devido à degradação molecular se dispersam *in vivo*, mas cujos produtos da degradação não são eliminados pelo organismo. Já o termo biorreabsorvível se emprega aos materiais que se degradam com a redução de sua massa molecular e os devidos produtos das reações são totalmente metabolizados e eliminados. Por sua vez, o termo bioabsorvível refere-se àqueles materiais que se dissolvem no organismo sem que ocorra a cisão das cadeias moleculares e sem redução de sua massa molecular. Todavia, no presente trabalho utilizaremos o termo bioabsorvível tanto para designar os próprios materiais bioabsorvíveis quanto os materiais biorreabsorvíveis.

²Apenas para exemplificar, além dos já conhecidos dispositivos bioabsorvíveis empregados em procedimentos de trauma e ortopedia (parafusos, âncoras, pinos etc), menciona-se o fato de a Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) ter autorizado, a partir de novembro de 2014, a comercialização de *stents* fabricados em polímero bioabsorvível para uso em procedimentos cardiovasculares (CAMBRICOLI, 2016).

torna-se a cada dia mais necessária uma melhor compreensão de seu comportamento sob diversos tipos de solicitação e condições de uso, tanto de uma perspectiva experimental quanto de modelagem matemática/numérica.

Embora os materiais poliméricos venham ganhando espaço em aplicações de desempenho estrutural, a compreensão do seu comportamento termomecânico é ainda desafiadora. Mesmo em condições de solicitação mecânica nas quais o comportamento de materiais usuais de engenharia pode ser representado por relações relativamente simples (ex. modelos elástico-lineares), o comportamento dos polímeros apresenta particularidades muito próprias. Em geral, esses materiais possuem forte sensibilidade a variáveis como taxa de deformação, tensão hidrostática, temperatura, condições químicas do ambiente etc.

À medida que as aplicações alcançam um certo nível de sofisticação tecnológica, um maior controle e uma menor margem de erros são exigidos no projeto e análise de sistemas mecânicos. Exemplo disso, encontra-se justamente na pesquisa e no desenvolvimento de componentes produzidos com materiais poliméricos bioabsorvíveis e empregados na medicina. Aplicações para fins médicos devem atender com extrema segurança a função para qual foram projetadas. Nessa área, a importância de um desenvolvimento criterioso de modelos numéricos mais representativos é discutida em trabalhos como o de [Moore, Soares e Rajagopal \(2010\)](#), no qual os autores frisam a necessidade de ferramentas adequadas de projeto para o desenvolvimento de *stents* fabricados com material bioabsorvível, e apresentam uma proposta de modelo de dano como alternativa para tal fim.

Uma das características mais importantes dos materiais biodegradáveis e dos bioabsorvíveis está associada ao fenômeno de hidrólise. Resumidamente, a hidrólise consiste em um processo químico no qual ocorre a quebra de ligações moleculares na presença de água. Não é intenção deste trabalho um aprofundamento quanto as reações químicas envolvidas nesse processo, e por isso, esse fenômeno será tratado em um contexto fenomenológico e discutido conjuntamente aos materiais bioabsorvíveis. O processo de degradação resultante da reação de hidrólise será abordado como um mecanismo de danificação dentro da estrutura fornecida pela Mecânica do Dano Contínuo, em específico no que se refere à perda de propriedades do material, mas não necessariamente restrito ao conceito relacionado à presença de microtrincas e microvazios.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho é apresentar uma proposta inédita de abordagem constitutiva variacional para a representação do comportamento elasto-viscoplástico de materiais sensíveis à danificação plástica e à degradação hidrolítica. As bases do modelo proposto estão fundamentadas em uma estrutura cinemática de deformações finitas e em um princípio de atualização constitutiva variacional (ORTIZ; STAINIER, 1999). Pretende-se que esse modelo seja capaz de representar as características associadas ao acoplamento entre fenômenos viscoplásticos, de dano mecânico dúctil e de degradação química hidrolítica. O modelo deve permitir o seu uso em códigos de elementos finitos laboratoriais e/ou comerciais, possibilitando assim a solução de diferentes casos de estudo. Desta forma, busca-se estabelecer uma estrutura que possa ser efetivamente utilizada no desenvolvimento de novas aplicações, produtos, testes etc., e que ainda seja facilmente adaptável a novas propostas de modelos que ampliem o domínio de aplicação da atual formulação.

1.3 CONTRIBUIÇÕES DA TESE

Tendo em vista os diversos aspectos abordados neste trabalho e a abrangência de informações alcançadas com a pesquisa bibliográfica realizada, destacam-se como principais contribuições desta tese:

- a extensão de um modelo constitutivo que acopla fenômenos de degradação química hidrolítica e dano plástico dúctil para uma estrutura cinemática de deformações finitas, que além disso inclui a representação de fenômenos viscoplásticos e tem como base um princípio de atualização constitutiva variacional;
- a elaboração de procedimento numérico-computacional para solução do problema constitutivo adequado à implementação em código de elementos finitos (laboratorial e comercial) e que poderá ser utilizado em experimentos para análise e caracterização de materiais poliméricos bi-oabsorvíveis e em simulações de produtos produzidos com esses materiais;
- a disponibilização de um conjunto de resultados numéricos que poderão ser utilizados como suporte para pesquisa de novos modelos constitutivos e no desenvolvimento de ensaios experimentais voltados à ca-

racterização de materiais que estejam sujeitos a processos de degradação mecânica e química (hidrolítica).

1.4 ESTRUTURA DO DOCUMENTO

A sequência deste documento está organizada tal como descrito a seguir. No Capítulo 2, apresenta-se uma revisão bibliográfica dos dois principais tópicos que fundamentam esta tese, isto é, na Seção 2.1 é possível encontrar uma breve revisão sobre modelos de degradação, particularmente para aqueles voltados à degradação hidrolítica, enquanto na Seção 2.2, tem-se uma descrição dos principais trabalhos de modelagem constitutiva que tomam como base teórica a estrutura de atualização variacional também utilizada na presente tese. O Capítulo 3 traz de forma sucinta a fundamentação teórica minimamente necessária ao desenvolvimento e entendimento do modelo proposto. Assim, na Seção 3.1.1, as principais características dos materiais poliméricos são revisadas, sendo em seguida na Seção 3.1.2 discutidos aspectos relacionados aos materiais poliméricos bioabsorvíveis e ao fenômeno de hidrólise. Alguns dos fundamentos da mecânica do dano e da termodinâmica do contínuo são apresentados respectivamente nas Seções 3.2 e 3.3. Conclui-se então o capítulo de fundamentação com uma exposição da estrutura geral do princípio de atualização constitutiva variacional (Seção 3.4). O Capítulo 4 pode ser considerado o mais importante entre todos, pois nele encontra-se o núcleo desta tese. Nesse capítulo, descreve-se a formulação constitutiva proposta em suas versões contínua e incremental. Diversas características das respostas provenientes do modelo, algumas de suas peculiaridades numéricas e exemplos típicos de aplicação são tratados no Capítulo 5. Encerra-se então a apresentação do trabalho com o Capítulo 6, no qual são feitas as considerações finais sobre a tese bem como algumas indicações e sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 MODELOS DE DEGRADAÇÃO

Nas últimas décadas, tem-se observado um crescente uso de materiais bioabsorvíveis na fabricação de implantes médicos (parafusos, âncoras de sutura, *stents* etc) resultando em avanços consideráveis em procedimentos traumatológicos, ortopédicos e cardiovasculares. O desenvolvimento desses produtos demanda um avançado conhecimento do comportamento termomecânico dos materiais empregados em sua fabricação. Usualmente, é possível obter um razoável entendimento sobre as características desses materiais por meio de ensaios físicos (tração, compressão etc) bem como através de simulações numéricas. Nesse contexto, um vasto número de estudos relacionados ao desenvolvimento de teorias e modelos que tratam do fenômeno de degradação têm sido publicados. Alguns desses trabalhos, considerados como de maior relevância para o desenvolvimento da presente tese, são brevemente apresentados a seguir.

Em [Rajagopal, Srinivasa e Wineman \(2007\)](#) é apresentada uma estrutura geral para modelos constitutivos voltados a materiais que sofrem degradação induzida por deformação. A formulação lá descrita permite que modelos relacionados a processos de danificação física ou química sejam prontamente adaptados àquela estrutura. Além disso, constantes associadas à representação dos materiais passam a ser alternativamente tratadas como funções dependentes do estado de degradação e não mais como constantes propriamente.

A proposta anterior é posteriormente adaptada por [Soares, Moore e Rajagopal \(2007, 2008\)](#), [Soares \(2008\)](#) e [Soares, Rajagopal e Moore \(2010\)](#) resultando em modelos que levam em conta efeitos de degradação devido ao fenômeno de hidrólise, sendo que tais trabalhos se direcionam especialmente ao desenvolvimento de *stents* poliméricos. Observa-se que, entre essas propostas, somente [Soares \(2008\)](#) acopla um modelo viscoelástico ao modelo de dano hidrolítico. Em todos os demais casos, efeitos dissipativos estão associados exclusivamente ao processo de danificação do material. Adicionalmente, é possível encontrar em [Soares \(2008\)](#) um vasto conjunto de resultados de ensaios realizados em fibras do material poli(L-ácido láctico) (PLLA).

Propostas similares, embora não contemplem a influência do estado de deformação, também estão presentes em publicações como as de [Vieira et al. \(2011b\)](#), [Vieira et al. \(2011a\)](#) e [Vieira, Guedes e Tita \(2012, 2014\)](#). Nes-

sas é possível identificar uma forma alternativa para avaliação da variável de degradação hidrolítica, sendo a mesma diretamente relacionada a fatores intrinsecamente químicos como concentrações de água e de grupos funcionais (éster, carboxílico) bem como a evolução do peso molecular. Como antes, os parâmetros constitutivos também são tratados como funções da variável de dano hidrolítico. Ressalta-se que em [Vieira, Guedes e Tita \(2014\)](#), os autores empregam a proposta de [Bergstrom e Boyce \(1998\)](#), trazendo assim elementos de uma formulação viscoelástica não linear ao modelo. Em termos de ensaios experimentais, esses trabalhos fornecem informações sobre a degradação de fibras da blenda polimérica PLA-PCL (90/10).

Seguindo ainda os conceitos do modelo de degradação hidrolítica introduzido por [Soares, Moore e Rajagopal \(2007\)](#), [Khan e El-Sayed \(2013\)](#) propõem um formulação viscoelástico em regime de deformações finitas baseada na estrutura de modelos de atualização constitutiva variacional ([ORTIZ; STAINIER, 1999](#)). Também nesse caso, o foco concentra-se claramente no desenvolvimento de *stents* poliméricos e assim modelos simplificados do par *stent-artéria* são avaliados com auxílio de um modelo em elementos finitos.

Com base na classe dos modelos anteriores, [Baek e Pence \(2009\)](#), [Baek e Pence \(2011\)](#) investigam fenômenos de degradação em materiais reforçados com fibras, propondo uma extensão da formulação de [Rajagopal, Srinivasa e Wineman \(2007\)](#) para o caso com múltiplos processos de degradação (matriz e fibras).

Adicionalmente, modelos voltados para fenômenos de concentração e difusão ([WANG et al., 2008](#); [RAJAGOPAL; MULIANA, 2009](#); [MULIANA; RAJAGOPAL, 2012](#)) contribuem para uma maior abrangência da aplicação dos modelos destinados à representação de efeitos de danificação química. A influência da concentração de um fluido no processo de degradação, dependendo das dimensões características do problema e do tempo em que os fenômenos (químicos, termomecânicos) se desenvolvem, pode ser determinante para se obter uma boa representação do processo de degradação do material.

Em [Fancello et al. \(2014\)](#), os autores apresentam uma formulação constitutiva que associa o fenômeno de danificação hidrolítica ao modelo clássico de Lemaitre para dano dúctil ([LEMAITRE, 1996](#); [LEMAITRE J.; DESMORAT, 2005](#)). Tal modelo traz o acoplamento de efeitos de danificação plástica-hidrolítica, sendo esse acoplamento uma característica até então exclusiva desse modelo, ao que se tem por conhecimento.

Claramente, o emprego de materiais que se degradam quimicamente não está restrito aos materiais poliméricos. Efeitos relacionados à oxidação e à corrosão de metais também são alvo de interesse de pesquisadores que

buscam representar tais fenômenos por meio de modelos numéricos. Trabalhos como os de [Bastos et al. \(2005\)](#), [Costa-Mattos, Bastos e Gomes \(2008\)](#), [Gastaldi et al. \(2011\)](#), [Grogan et al. \(2011\)](#), [Costa-Mattos, Bastos e Gomes \(2014\)](#) trazem uma perspectiva complementar à análise do problema da degradação de materiais que poderá ser considerada na busca por modelos mais abrangentes com aplicação para diferentes tipos de degradação química em uma única formulação constitutiva.

Revisões bibliográficas como as apresentadas por [Bergstrom e Hayman \(2015\)](#), [Bobel et al. \(2015\)](#), [Boland et al. \(2015\)](#) e [Soares e Moore James E. \(2015\)](#) indicam evidências do crescente interesse sobre formulações e experimentos direcionados à avaliação das características dos fenômenos de degradação química. Contudo, deve-se observar que apesar do atual nível de conhecimento estabelecido, o estudo e a formulação de modelos relacionados a esses fenômenos não devem ser considerados consolidados, estando assim abertos a investigações e ao desenvolvimento de novos modelos.

Para finalizar, as Tabelas [2.1](#) e [2.2](#) resumem as principais características dos modelos apresentados acima.

Tabela 2.1: Quadro resumo para modelos de degradação selecionados (1).

Referência	Cin. finita	Aplicação	Geometria	Material	Teste
Rajagopal, Srinivasa e Wineman (2007)	sim	stents	anel		cisalhamento, flexão
Soares, Moore e Rajagopal (2007)	não	stents			expansão, cíclico
Soares, Moore e Rajagopal (2008)	sim	stents			
Soares (2008)	sim	stents	anel,fibra,stent, etc	PLLA	expansão, cis., torção, tração
Soares, Rajagopal e Moore (2010)	sim	stents	anel		expansão, tração
Vieira et al. (2011b)	sim			PLA-PCL	tração
Vieira et al. (2011a)	sim		fibra	PLA-PCL	tração
Vieira, Guedes e Tita (2012)	sim		corda (rope)	PLA-PLC	tração
Vieira, Guedes e Tita (2014)	sim	ligamentos		PLA-PCL	tração
Khan e El-Sayed (2013)	sim	stents	anel	PLLA	expansão
Baek e Pence (2009)	sim	tecidos			tração (+inchamento)
Baek e Pence (2011)	sim	tecidos			tração
Rajagopal e Muliana (2009)	sim		placa (<i>slab</i>)		cisalhamento
Muliana, Rajagopal e Subramanian (2009)	não		anéis concêntricos		
Muliana e Rajagopal (2012)	sim	stents	anéis concêntricos		
Fancello et al. (2014)	não		barra e placa c/ entalhe		tração
Bastos et al. (2005)	não		cp d=4mm l=16mm	AlSi 304	tração
Costa-Mattos, Bastos e Gomes (2008)	não		cp d=4mm l=16mm	AlSi 304	tração
Costa-Mattos, Bastos e Gomes (2014)	não		cp d=4mm l=16mm	AlSi 304	tração
Grogan et al. (2011)		stents		magnésio	abertura stent+artéria
Gastaldi et al. (2011)		stents		magnésio	abertura stent

Cin. cinemática, cis. cisalhamento, cp. corpo de prova, d. diâmetro, l. comprimento

Tabela 2.2: Quadro resumo para modelos de degradação selecionados (2).

Referência	Atual. var.	Dano dúctil	Visco	Potencial	Código
Rajagopal, Srinivasa e Wineman (2007)	não	não	não	neo-Hookean	Matlab (ODE113)
Soares, Moore e Rajagopal (2007)	não	não	não	elástico	EFNL
Soares, Moore e Rajagopal (2008)	não	não	não	neo-Hookean	
Soares (2008)	não	não	viscoelástico	n-H, M-R, P2nd	EFNL, Abaqus (UMAT)
Soares, Rajagopal e Moore (2010)	não	não	não	Knowles	R-K
Vieira et al. (2011a)	não	não	não	n-H, M-R, P2nd	
Vieira, Guedes e Tita (2012)	não	não	não	n-H, M-R, P2nd	
Vieira, Guedes e Tita (2014)	não	não	não	neo-Hookean	
Khan e El-Sayed (2013)	sim	não	(viscoelástico)	BB	Abaqus-Python-UMAT
Baek e Pence (2009)	não	não	viscoelástico	Odgen	Abaqus-Python-UMAT
Baek e Pence (2011)	não	não	não	n-H + (fibras)	MCalibration
Rajagopal e Muliana (2009)	não	não	não	n-H + (fibras)	Abaqus (UMAT)
Muliana, Rajagopal e Subramanian (2009)	não	não	não		Abaqus (UMAT)
Muliana e Rajagopal (2012)	não	não	QLV		Abaqus (UMAT)
Fancello et al. (2014)	não	sim	não		
Bastos et al. (2005)	não	sim	sim		
Costa-Mattos, Bastos e Gomes (2008)	não	sim	sim		
Costa-Mattos, Bastos e Gomes (2014)	não	sim	sim		
Grogan et al. (2011)	não	não	não		
Gastaldi et al. (2011)	não	não	não		Abaqus (VUMAT)
					Abaqus (VUMAT / VUSDFLD)

Atual. var. atualização variacional, n-H, neo-Hookean, M-R, Mooney-Rivlin, P2nd. Potencial de segunda ordem, BB, Bergstrom-Boyce, QLV quase linear viscoelástico, UMAT/VUMAT. material do usuário (solução: implícita/explicita), EFNL. Elementos finitos não linear, R-K. Runge-Kutta

2.2 MODELOS DE ATUALIZAÇÃO VARIACIONAL

Em um contexto de uma abordagem fenomenológica, relações constitutivas podem ser formuladas, por exemplo, por meio de princípios variacionais. Embora, em geral, modelos variacionais estejam limitados a problemas conservativos ou a poucos fenômenos não conservativos, a estrutura baseada na classe dos modelos de *atualização constitutiva variacional* proposta em [Ortiz e Stainier \(1999\)](#) e [Radovitzky e Ortiz \(1999\)](#) tem sido utilizada com sucesso na solução de diversas categorias de problemas termomecânicos dissipativos (veja Tabela 2.3). A aplicação dos métodos variacionais em problemas mecânicos não é propriamente uma novidade, aparecendo em princípios conservativos clássicos como os de Lagrange e Hamilton ou ainda em problemas dissipativos como no caso do princípio da máxima dissipação ([SIMO; HUGHES, 1998](#)). Uma perspectiva histórica dos métodos variacionais foge ao escopo deste trabalho, mas poderá ser consultada em textos como os de [Lanczos \(1970\)](#) e [Berdichevsky \(2009a, 2009b\)](#). Como veremos, uma abordagem variacional apresenta características atraentes, tanto do ponto de vista de sua estrutura matemática, quanto de sua associação natural à descrição de problemas físicos, sendo essas algumas das fontes motivadoras desta pesquisa.

[Ortiz e Stainier \(1999\)](#) apresentam uma classe de procedimento de atualização constitutiva (*constitutive updates*) que abrange o comportamento de sólidos viscoplásticos. Em linhas gerais, propõe-se que as relações incrementais de tensão-deformação são originárias de um pseudo-potencial, cuja existência confere ao problema de valor de contorno uma estrutura variacional. Tal como nas formulações clássicas, a proposta se encontra fundamentada nas bases da termodinâmica do contínuo com o uso de variáveis internas. Os processos internos são descritos por conjuntos de equações em forma de taxa, sendo que o formalismo adotado no tratamento das variáveis internas faz uso de restrições internas não holonômicas. Para uma dada taxa de deformação, tem-se que as taxas das variáveis internas e a direção do fluxo plástico são derivadas de um princípio variacional que generaliza o princípio de máxima dissipação. Esse formalismo, descrito em termos de taxas das variáveis internas, é estendido para uma versão discreta no tempo, de maneira a se obter um algoritmo constitutivo incremental. Assim, por meio da minimização de uma função denominada potencial incremental, formada pela combinação da taxa de energia livre, um potencial inelástico conjugado e um potencial viscoso, obtêm-se para cada incremento de tempo o valor atualizado das variáveis internas e a direção de escoamento plástico. Como afirmado anteriormente, o

mínimo do potencial incremental age tal como um potencial para as relações tensão-deformação, garantindo o carácter variacional da atualização. A atualização constitutiva fica então reduzida a um problema de otimização não linear, permitindo a obtenção dos novos valores das variáveis internas e dos parâmetros cinemáticos, tal como aquele estabelecido pela direção do fluxo plástico. Entre as dificuldades da referida proposta está o fato de a densidade de energia de deformação pseudo-elástica ser, em geral, não convexa, o que resultaria no crescimento de oscilações na solução do problema. Contudo, [Ortiz e Stainier \(1999\)](#) argumentam que certas formulações de viscosidade regularizariam o problema, permitindo que tal densidade de energia de deformação pseudo-elástica, uma vez discretizada no tempo, passe a ser quase convexa para passos de tempo suficientemente pequenos.

A partir dessa proposta, surgem vários modelos em contextos diversos que abrangem desde problemas relacionados a materiais biológicos até aqueles envolvendo estimativa de erro e refino de malha bem como problemas de acoplamento termomecânico, entre outros.

No tocante a modelos viscoelásticos, bem como viscoplásticos, [Fancello, Ponthot e Stainier \(2006\)](#) e [Fancello, Vassoler e Stainier \(2008\)](#) propõem uma reformulação por meio de uma representação espectral da clássica decomposição da deformação inelástica em amplitude e direção. Tal procedimento permite a adequação de simples expressões analíticas a diversos modelos pela escolha apropriada do potencial constitutivo.

Uma extensão das duas propostas anteriores é apresentada então por [Vassoler, Reips e Fancello \(2012\)](#). Esses introduzem uma parcela anisotrópica à formulação com o objetivo de representar o comportamento de materiais viscoelásticos reforçados por fibras, caso típico de tecidos biológicos. Ainda nesse contexto, em trabalho recente, [Vassoler, Stainier e Fancello \(2016\)](#) incorporam características associadas à danificação de fibras a uma formulação para materiais biológicos, atribuindo assim ao modelo a capacidade de representação de um comportamento do tipo efeito Mullins. Modelo também destinado a tecidos biológicos moles foi apresentado por [Sayed et al. \(2008\)](#) em uma formulação abrangente, a qual contempla diversos aspectos desses materiais tais como efeitos viscoelásticos, elastoplásticos, térmicos e sensibilidade à tensão volumétrica, contudo desconsiderando uma contribuição explícita proveniente das fibras.

Os artigos de [Mosler \(2009\)](#) e [Mosler e Bruhns \(2009\)](#) trazem uma formulação variacional para problemas de plasticidade não associativa. Tal como nos casos de modelos dos tipos Drucker-Prager e Mohr-Coulomb, os autores adotam uma separação desviadora-volumétrica da energia livre de

Helmholtz e da função de escoamento. Além disso, exemplos numéricos indicam que a proposta é potencialmente eficiente e robusta. Ainda no contexto dos problemas não associativos, Mosler (2010a, 2010b) emprega a estrutura do clássico modelo de Armstrong-Frederick a fim de representar efeitos relacionados ao encruamento cinemático não linear. Já em Mosler e Bruhns (2010), os autores introduzem uma abordagem para casos de plasticidade anisotrópica, sendo tal abordagem inspirada nos modelos de Hill e de Barlat. Adicionalmente, é possível encontrar aplicações para elementos estruturais tal como apresentado no trabalho de Mosler e Cirak (2009), no qual a formulação baseada em atualizações variacionais é empregada no estudo de plasticidade e enrugamento de membranas.

Em Yang, Stainier e Ortiz (2006), por sua vez, temos uma proposta de formulação variacional do problema de valor de contorno com acoplamento termomecânico. A validação de tal proposta é então confirmada através de resultados experimentais apresentados em Stainier e Ortiz (2010). Em estudo realizado para três materiais metálicos: alumínio 2024-T3, α -titânio e tântalo policristalino puro; demonstra-se a capacidade do modelo variacional em prever a taxa de aquecimento do material como resultado do processo dissipativo. Isso sem a necessidade de definir *a priori* uma função que forneça a parcela de trabalho plástico convertido em calor. Contudo, em uma análise posterior, Stainier (2011) conclui que uma dependência explícita do potencial de dissipação em relação à temperatura resulta em uma perda de consistência do problema quando uma integração implícita é empregada. Dessa forma, Stainier (2011) propõe uma expressão alternativa que evita que tal fato ocorra. Uma abordagem abrangente da formulação variacional para problemas termomecânicos poderá ser consultada em Stainier (2013). Adicionalmente, trabalhos como os de Bartels et al. (2015), Canadiza e Mosler (2016) e Selke (2016) trazem uma recente perspectiva sobre problemas termomecânicos ao tratarem respectivamente de questões como encruamento baseado em equações de evolução não associativa, fadiga de baixo ciclo e abordagem de dano não local.

Em Kintzel e Mosler (2010), os autores apresentam uma formulação variacional para um modelo de dano elastoplástico isotrópico em regime de pequenas deformações, o qual assemelha-se ao clássico modelo de Lemaitre. Nesse caso, foram empregadas equações de evolução não lineares e não associativas. Além disso, o artigo também apresenta uma comparação de desempenho entre a formulação variacional e o clássico esquema de mapeamento de retorno. Através da simulação de uma condição de carregamento uniaxial monotônico representada por meio de um modelo tridimensional, o estudo in-

dica que quando empregado o método variacional ocorre uma grande redução do número de incrementos necessários para se alcançar a solução final. Também nesse trabalho, os autores destacam a necessidade de elaboração de uma formulação variacional consistente para os casos que incluam a degradação do material (evolução do dano). Já em [Kintzel, Khan e Mosler \(2010\)](#), uma parcela frágil é incorporada ao dano total. Nesse caso, surge uma proposta de modelo para um comportamento dúctil-frágil, característica usualmente associada ao comportamento de materiais como a liga de alumínio Al2024. A resposta mecânica desse material, por exemplo, possui uma dependência relacionada à orientação de sua estrutura interna, o que leva a um comportamento que varia entre o dúctil e o frágil de acordo com a direção de carregamento. Devido à estrutura estabelecida em tal formulação, as parcelas correspondentes ao problema dúctil e ao problema frágil tornam-se desacopladas. Então, uma estratégia de solução em etapas pode ser empregada, de modo que, em primeiro lugar, resolve-se o problema relacionado à parcela dúctil e, em seguida, obtém-se a solução para a parcela frágil. Ainda nesse mesmo artigo, uma estratégia para redução do número de parâmetros de material a serem identificados é sugerida. Tal proposição recorre a uma análise preliminar de parâmetros por meio de teorias consagradas como a lei de Paris ([PARIS; GOMEZ; ANDERSON, 1961](#)). Em [Kintzel e Mosler \(2011\)](#), o mesmo modelo dúctil-frágil é novamente empregado, desta vez, sendo aplicado à análise de fadiga de baixo ciclo. Problemas relacionados à singularidade da matriz hessiana são analisados e uma solução fechada para sua inversa é derivada. Propostas de modelos para dano inspirados em formulações tais como a de [Gurson \(1977\)](#) são também encontrados em versões baseadas em atualizações variacionais, por exemplo em [Weinberg, Mota e Ortiz \(2006\)](#) e [Siddiq, Arciniega e Sayed \(2012\)](#). Recorda-se ainda que, como descrito na seção anterior, [Khan e El-Sayed \(2013\)](#) também empregam a estrutura de atualização constitutiva variacional em sua proposta de um modelo de dano hidrolítico.

Por uma perspectiva de desempenho numérico, o artigo de [Brassart e Stainier \(2012\)](#) faz uma comparação entre a formulação variacional e o tradicional algoritmo de retorno radial. Mostra-se que, para casos nos quais encruamento e dependência às taxas estão combinados, a escolha de um esquema de integração de ponto médio generalizada resulta em diferenças entre as formulações. Essas diferenças ficam evidenciadas pela presença de um parâmetro algorítmico e um termo adicional na equação de fluxo plástico. O trabalho apresenta então uma avaliação da convergência do algoritmo variacional em função da escolha apropriada de tal parâmetro algorítmico. Ainda considerando aspectos relacionados à eficácia numérica do método, [Bleier](#)

e Mosler (2012) mostram que a escolha inapropriada de uma regra de escoamento pode levar a problemas numéricos associados à singularidade da matriz hessiana em um esquema de Newton-Raphson. Para contornar tal problema uma nova parametrização para a regra de escoamento é sugerida de modo a permitir a construção de um algoritmo eficiente.

Os métodos variacionais também se aplicam a problemas de homogeneização e multiescala. Em Brassart et al. (2011, 2012) encontramos uma abordagem para obtenção da resposta homogeneizada de materiais compostos que apresentam respectivamente comportamento elastoplástico e elasto-viscoplástico, estabelecendo assim uma estrutura única para problemas independentes ou dependentes da taxa de deformação plástica em função de uma escolha adequada do potencial de dissipação. Esse método foi aplicado à solução de problemas de elastoplasticidade e elasto-viscoplasticidade para materiais compostos formados por uma matriz contínua com reforço de inclusões elipsoidais. Resultados promissores foram obtidos para a resposta macroscópica em diversos casos, incluindo condições de carregamento cíclico. Já Balzani e Ortiz (2012) mostram o emprego do método na descrição do comportamento de materiais reforçados por fibras e microestrutura tipo treliça sujeitos a um processo de danificação. Trabalhos como o de Bleier e Mosler (2012) também exploram o potencial de uma estrutura variacional na formulação de um problema de multiescala.

Radovitzky e Ortiz (1999) destacam que a abordagem variacional possibilita uma formulação matemática apropriada à estimativa de erro e adaptação de malha em problemas não lineares. Exemplos de publicações dentro desse contexto são encontrados nos trabalhos de Mosler e Ortiz (2007) e Mosler e Ortiz (2009).

A Tabela 2.3 apresenta um quadro resumo dos artigos apresentados entre as diversas áreas de aplicação.

Como visto, um grande esforço tem sido empreendido ao longo das últimas décadas contribuindo para consolidação dos modelos variacionais em diversos ramos de estudo. Tal fato reforça nosso interesse pelo método, possibilitando vislumbrar novas oportunidades de aplicação. Nota-se, por exemplo, a ausência na literatura de um modelo para viscoplasticidade que incorpore o processo de danificação plástica-hidrolítica para o caso de deformações finitas. Portanto, uma vez estabelecida as bases para tal modelo, aspectos como a inclusão de uma dependência à tensão hidrostática, acoplamento termomecânico, efeitos não locais, entre outros poderão ser explorados na tentativa de se construir uma estrutura cada vez mais abrangente.

A seguir, faz-se a introdução dos fundamentos que serão a base da

proposta apresentada no Capítulo 4.

Tabela 2.3: Quadro resumo. Aplicação dos modelos de atualização variacional.

Campo de estudo e aplicação	Referência
Tecidos biológicos	Sayed et al. (2008) Vassoler, Reips e Fancello (2012) Vassoler, Stainier e Fancello (2016)
Multiescala	Bleier e Mosler (2013)
Homogeneização de compostos	Brassart et al. (2011) Brassart et al. (2012) Balzani e Ortiz (2012)
Termomecânico	Yang, Stainier e Ortiz (2006) Stainier e Ortiz (2010) Stainier (2011) Stainier (2013) Bartels et al. (2015) Canadiza e Mosler (2016) Selke (2016)
Elctromagnético-mecânico	Miehe, Rosato e Kiefer (2011)
Elastoplástico, viscoelástico, viscoplástico	Ortiz e Stainier (1999) Fancello, Ponthot e Stainier (2006) Fancello, Vassoler e Stainier (2008) Mosler e Bruhns (2009) Mosler (2009) Mosler e Cirak (2009) Mosler e Bruhns (2010) Mosler (2010a), Mosler (2010b) Brassart e Stainier (2012) Bleier e Mosler (2012)
Dano mecânico	Weinberg, Mota e Ortiz (2006) Kintzel e Mosler (2010) Kintzel, Khan e Mosler (2010) Kintzel e Mosler (2011) Siddiq, Arciniega e Sayed (2012) (Canadiza e Mosler (2016), Selke (2016))
Degradação química	Khan e El-Sayed (2013)
Estimativa de erros / Refino de malha	Radovitzky e Ortiz (1999) Mosler e Ortiz (2007) Mosler e Ortiz (2009)

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 MATERIAIS POLIMÉRICOS, POLÍMEROS BIOABSORVÍVEIS E HIDRÓLISE

3.1.1 Materiais poliméricos

Nesta seção, descreve-se de forma sucinta diversos aspectos relacionados aos materiais poliméricos. Em essência, segue-se aqui o textos de [Ward e Sweeney \(2004\)](#), [Callister \(2007\)](#) e [Argon \(2013\)](#).

Características dos polímeros

Polímeros são materiais formados por macromoléculas dispostas na forma de cadeias atômicas longas e flexíveis, as quais são constituídas por unidades elementares chamadas meros. Um único mero quando analisado isoladamente recebe a denominação de monômero. A grande maioria dos polímeros possui sua origem em moléculas orgânicas (moléculas de hidrocarbonos). Como exemplo, a Figura 3.1 apresenta respectivamente a fórmula estrutural de uma molécula de etileno, seu correspondente mero (unidade de repetição) e de uma molécula de polietileno.

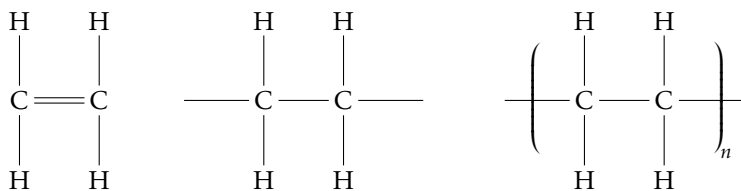


Figura 3.1: Representação da molécula de etileno (esquerda), mero ou unidade de repetição (centro) e molécula de polietileno (direita).

A obtenção desses materiais é feita através de processos de polimerização (reações química que dão origem ao polímero), ou seja, sob condições químicas e físicas apropriadas, monômeros são agrupados sequencialmente formando as cadeias poliméricas.

Inúmeros grupos de materiais são classificados como materiais poliméricos, por exemplo, os plásticos, elastômeros (borrachas), revestimentos,

adesivos, espumas e filmes plásticos. Raramente os polímeros serão utilizados em sua forma pura. É usual que eles recebam adição de cargas, plastificantes, estabilizadores, aceleradores, corantes etc., sendo que essas substâncias promovem alterações significativas na processabilidade e nas propriedades originais dos polímeros. Tais aditivos permitem a obtenção de materiais que se adaptem a diferentes tipos de aplicação. Contudo, deve-se observar que a melhoria de certas propriedades sempre virá ao custo de outras.

Os polímeros são formados por quatro tipos principais de cadeias: lineares, ramificadas, de ligações cruzadas e em rede. As cadeias lineares são aquelas formadas pela repetição das unidades elementares (meros) em uma única cadeia (Figura 3.2-a), sendo que as macromoléculas se unem por forças secundárias dos tipos van der Waals e pontes de hidrogênio. Exemplos de materiais formados por esse tipo de cadeia são o polietileno (PE), o policloreto de vinila (PVC), o polimetil metacrilato (PMMA), as poliamidas (PA) e os fluorcarbonos. As cadeias ramificadas são aquelas em que extensões laterais em cadeias lineares as conectam a outras cadeias tal como ilustrado na Figura 3.2-b. São formados por esse tipo de estrutura polímeros como o polietileno de baixa densidade (PEBD, ou do inglês LDPE). Por sua vez, estruturas formadas por ligações cruzadas são aquelas em que cadeias adjacentes se unem fortemente por ligações covalentes (Figura 3.2-c), como é o caso das borrachas vulcanizadas. Por último, tem-se as cadeias em rede (Figura 3.2-d), nas quais monômeros multifuncionais formam três ou mais ligações covalentes resultando em redes moleculares tridimensionais. Entre os materiais desse grupo estão os epóxis, o poliuretano (PU) e o fenol formaldeído (ex. baquelite).

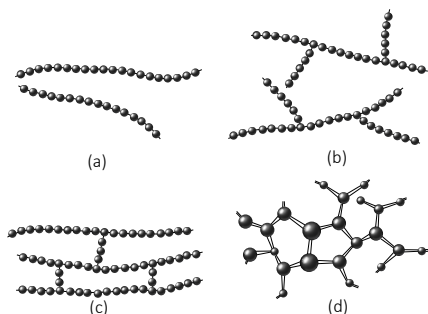


Figura 3.2: Estruturas típicas das cadeias poliméricas: (a) linear, (b) ramificada, (c) ligações cruzadas, (d) em rede. Adaptado de [Callister \(2007\)](#).

As cadeias podem também assumir diferentes formas que permitem a rotação, flexão e dobramento das mesmas. Além disso, em diferentes graus, elas estarão intercaladas e entrelaçadas entre si. Essas características como um todo (tamanho, estrutura, forma) são base fundamental das principais propriedades termomecânicas dos polímeros, sendo intimamente relacionadas a maior ou menor possibilidade de movimentação das cadeias, capacidade de deformação do material, sua rigidez e resistência mecânica etc.

Os polímeros podem ser separados em duas categorias, a dos termoplásticos e a dos termofixos. Essa divisão se dá devido às características de cada grupo no que diz respeito à mobilidade das cadeias poliméricas e em função da temperatura. Os termofixos possuem suas macromoléculas unidas por ligações cruzadas, o que lhes atribui as seguintes particularidades. No caso dos plásticos termofixos, esses se apresentam na forma de materiais rígidos e frágeis. No caso dos elastômeros, possuem uma grande elasticidade. Tais materiais são identificados pela impossibilidade de remodelagem sob ação da temperatura. Por sua vez, os termoplásticos possuem ligações químicas secundárias entre suas moléculas, conferindo-lhes maior ductilidade quando comparados aos termofixos. Sendo assim, podem ser remodelados, pois devido a sua estrutura interna ocorrerá uma maior movimentação relativa de suas moléculas sob efeito da temperatura.

Outro ponto importante relacionado às propriedades dos polímeros é seu grau de cristalinidade. Nos materiais poliméricos, em razão de sua estrutura molecular, os arranjos atômicos são mais complexos que em materiais metálicos e cerâmicos. A cristalinidade nos polímeros ocorre a partir do empacotamento de suas moléculas, resultando em uma relativa organização cristalina de seus átomos. Devido ao tamanho e complexidade das moléculas, os materiais poliméricos possuem apenas um certo grau de cristalinidade, isto é, em geral eles serão parcialmente cristalinos (semicristalinos), ou por outro lado, totalmente amorfos. Assim, o que se observa em muitos casos são regiões cristalinas dispersas em uma matriz amorfa. A cristalinidade dos polímeros está diretamente relacionada com: a taxa de resfriamento durante sua solidificação, a configuração das cadeias poliméricas e o estado de deformação em que o material se encontra. Como consequência do arranjo cristalino, a densidade desses materiais será tanto maior quanto maior o seu grau de cristalização. A Figura 3.3 ilustra de forma esquemática a distribuição e o empacotamento das cadeias poliméricas bem como a imagem de um esferulito, estrutura típica em polímeros.

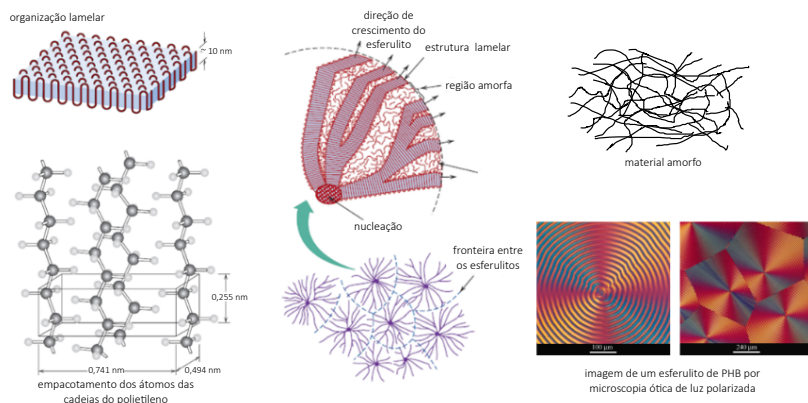


Figura 3.3: Organização lamelar das moléculas de um polímero (esquerda superior). Empacotamento dos átomos das cadeias poliméricas de polietileno (esquerda inferior). Estrutura de um esferrulito (centro). Cadeias de um material amorfo (direita superior). Imagem de microscopia ótica do material polihidroxibutirato (PHB). Figuras adaptadas de Callister (2007) e imagem microscópica obtida de DoITPoMS.

Também como função da temperatura, os polímeros amorfos e semi-cristalinos podem se apresentar em um estado vítreo ou borrachoso. À medida que há uma redução de temperatura, ocorre uma diminuição da movimentação das moléculas. Assim, quando o material é resfriado abaixo de um certo ponto T_g (temperatura de transição vítrea), esse passa de um estado borrachoso (flexível) para um estado vítreo (rígido), sendo o processo inverso também possível. A transição entre esses estados causa uma mudança brusca de propriedades do material, por exemplo, variação da rigidez, do calor específico e do coeficiente de expansão térmica. Muitos materiais possuem uma temperatura de transição acima da temperatura ambiente, por isso, deve-se ter um bom conhecimento dessa propriedade para se evitar condições de trabalho próximas à T_g ou que transitem pela mesma.

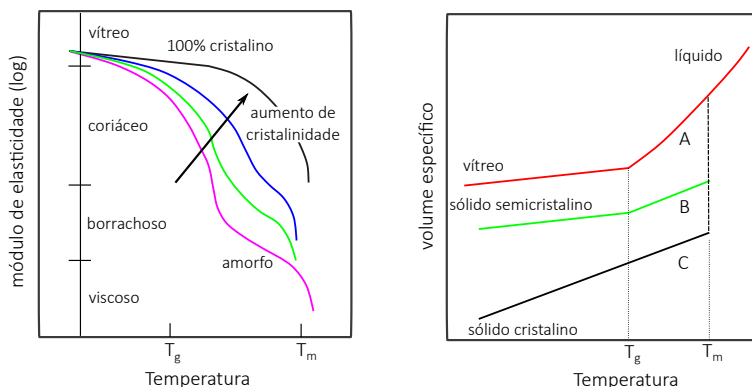


Figura 3.4: Variação de propriedades em relação à temperatura de transição vítrea T_g e à temperatura de fusão T_m .

As propriedades mecânicas dos polímeros são ainda influenciadas por quatro fatores: peso molecular, grau de cristalização, pré-deformação (plástica) e tratamento térmico.

O peso molecular tem pouca influência sobre o módulo elástico, mas é responsável pela maior ou menor resistência à tração. Embora considerado, sob um certo ponto de vista, de menor relevância em relação à rigidez do material, espera-se que para materiais com maior peso molecular o módulo elástico seja maior. Também quanto maior o peso molecular, maior deverá ser a resistência do material.

O grau de cristalização possui grande influência sobre as propriedades dos polímeros, pois está relacionado com a capacidade de movimentação das cadeias poliméricas, afetando o módulo de elasticidade, a resistência do material, sua ductilidade etc. O grau de cristalização afeta essas propriedades mecânicas, pois devido às ligações mais fortes entre as moléculas nas regiões cristalinas a resistência à deformação tende a ser maior, como consequência, a rigidez deve aumentar significativamente em relação às regiões amorfas. A resistência deve também aumentar, pois as regiões cristalinas agem tal como se fossem entrelaçamentos extras entre as moléculas, ou ainda, como partículas de maior resistência, funcionando como barreiras contra a deformação. Além disso, o material tende a se tornar mais frágil.

A pré-deformação (plástica) faz com que o material passe a apresentar propriedades anisotrópicas. Quando submetido a um carregamento orientado uniaxialmente, o material poderá adquirir um módulo elástico maior na dire-

ção axial de deformação do que em relação às demais, apresentado o menor valor a 45° da direção de carregamento. De forma similar, a resistência aumentará na direção paralela à deformação axial, enquanto na direção perpendicular se reduzirá significativamente. De forma similar, em processos de deformação como trefilação e extrusão, as cadeias poliméricas em regiões amorfas são orientadas assemelhando-se àquelas nas regiões cristalinas, e apesar de uma menor intensidade do que nessas regiões, as ligações intermoleculares tornam-se mais fortes, consequentemente aumentando a resistência e rigidez do material.

Os tratamentos térmicos também afetam a estrutura cristalina dos polímeros. Como resultado das modificações no grau de cristalinidade do material, para um tratamento à temperatura constante, quanto maior a temperatura, maiores serão o módulo elástico e a resistência resultantes, e menor a ductilidade do material.

Tal como os materiais metálicos e cerâmicos, algumas das propriedades mecânicas comumente empregadas para caracterizar os polímeros são o módulo de elasticidade, a resistência à tração e compressão, a deformação de ruptura, a resistência ao impacto e à fadiga. Contudo, como afirmado anteriormente, as propriedades desses materiais são muito mais sensíveis a fatores como temperatura, condições químicas do ambiente, taxa de deformação etc., levando a uma faixa de valores bem ampla dessas propriedades. Diferentes tipos de resposta mecânica são observados em ensaios de tração uniaxial dependendo do tipo de polímero avaliado. Materiais poliméricos com comportamento macroscopicamente frágil apresentam um comportamento proeminentemente linear e possuem pouca capacidade de deformação (curva A da Figura 3.5). Já polímeros com uma maior tenacidade frequentemente apresentam comportamento tal como se observa na curva B da Figura 3.5, com uma região elástica (viscoelástica) seguida de uma região com deformações permanentes (viscoplástica). Um terceiro grupo, o dos materiais elastoméricos, apresenta essencialmente uma resposta elástica, mesmo quando submetidos a grandes níveis de deformação (curva C na Figura 3.5). Adicionalmente, a Figura 3.6 traz como exemplo curvas de tração-deformação para alguns materiais usualmente empregados em engenharia (GSELL et al., 1992).

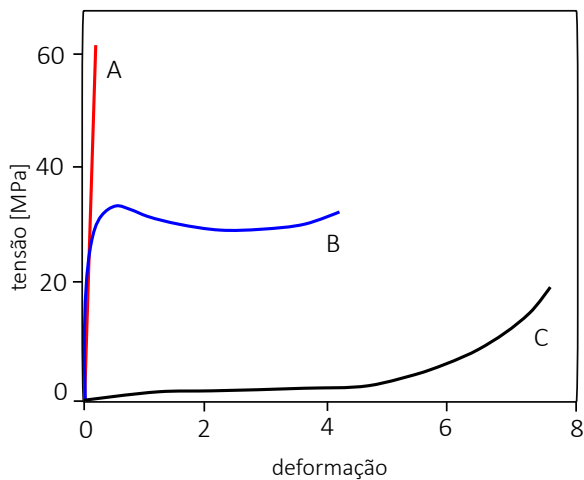


Figura 3.5: Curvas de tensão vs. deformação para diferentes tipos de materiais: frágil (A), dúctil (B), borrachoso (C). Adaptado de [Callister \(2007\)](#).

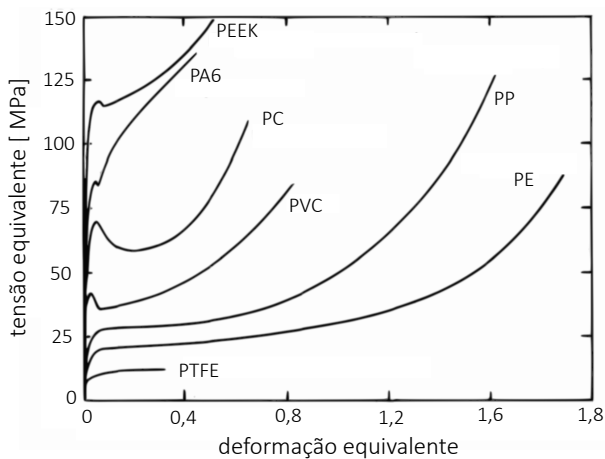


Figura 3.6: Comportamento à tração para vários materiais à temperatura de 25°C e uma taxa de deformação de 10^{-4} s^{-1} . Adaptado de [GSell et al. \(1992\)](#)

A Figura 3.7 mostra um exemplo do comportamento de dois materiais, polietileno de alta densidade (PEAD) e policarbonato (PC), sob a influência da temperatura (GSell et al., 1992). Nota-se claramente que, para uma faixa de variação de temperatura relativamente pequena, se comparada à resposta dos metais e das cerâmicas para uma mesma variação, ocorre uma grande mudança no comportamento dos materiais.

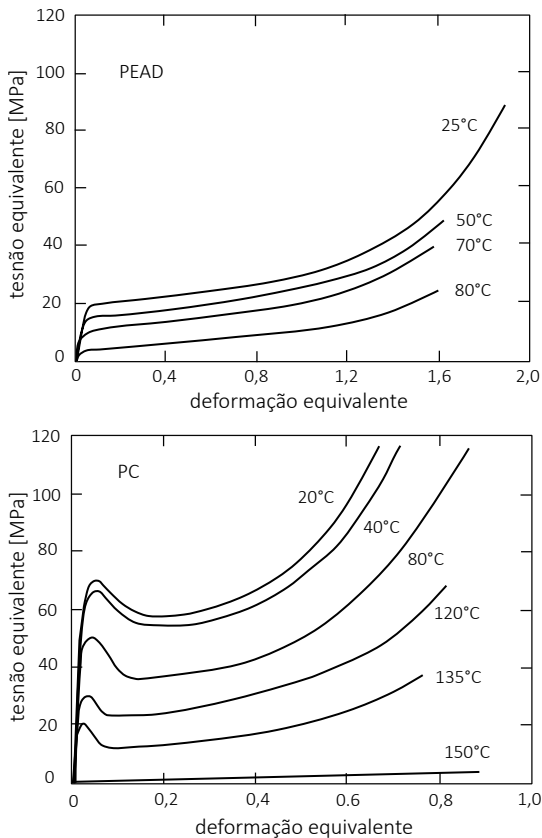


Figura 3.7: Influência da temperatura nas curva de tensão-deformação para PEAD e PC. Adaptado de GSell et al. (1992).

A taxa de deformação também é fator determinante no comportamento dos polímeros. À medida que essa aumenta, os materiais apresentam uma

maior resistência à deformação com consequente aumento da tensão e possível fragilização do material (Figura 3.8).

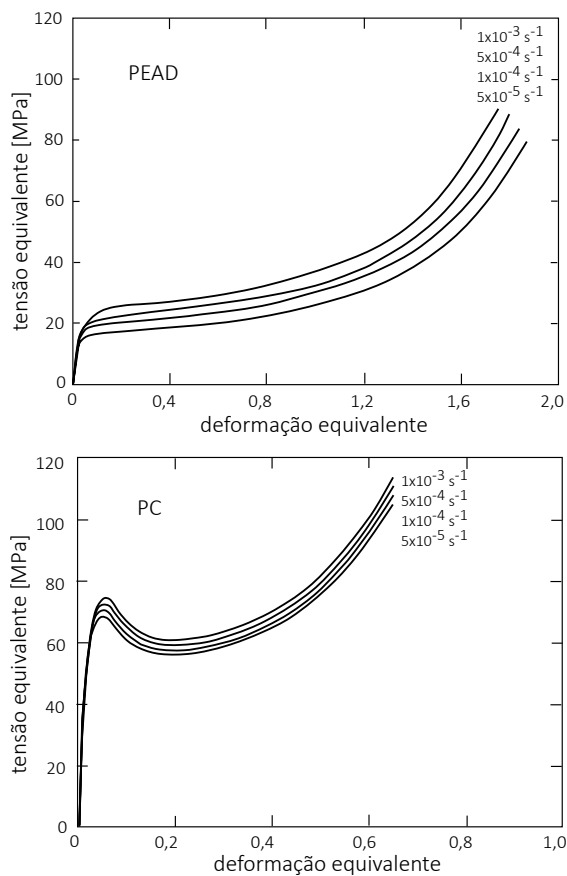


Figura 3.8: Efeitos da taxa de deformação nas curvas de tensão-deformação. Materiais PEAD e PC. Adaptado de Gsell et al. (1992)

Outras características ainda relativas à viscosidade são fenômenos como a relaxação de tensões, a fluência e a recuperação viscoelástica (ou viscoplástica). A Figura 3.9 mostra esquematicamente o comportamento característico para esses fenômenos em relação a diferentes tipos de sollicitação. Em geral, essas são algumas das respostas que se busca representar através

de modelos constitutivos, bem como são aproximações de ensaios utilizados na identificação de parâmetros para tais modelos.

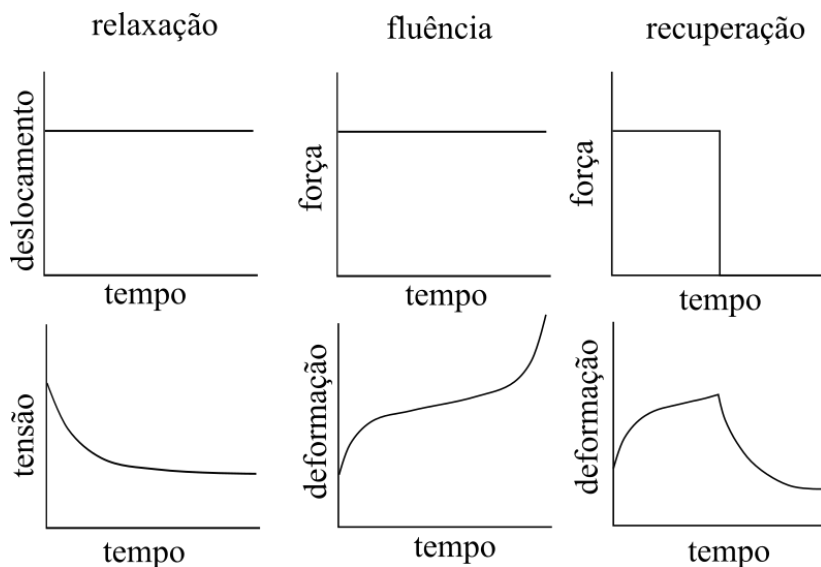


Figura 3.9: Representação esquemática dos fenômenos viscosos de relaxação, fluência e recuperação.

Segundo [Duan et al. \(2001\)](#), os polímeros amorfos vítreos à temperatura ambiente exibem um comportamento viscoelástico seguido de escoamento com um amolecimento e posterior enrijecimento viscoplástico orientado, como o mostrado na Figura 3.10. Por sua vez, os polímeros semicristalinos devem apresentar comportamento distinto, pois esses não exibem amolecimento na curva como os amorfos, mas apresentam uma resposta viscoelástica com posterior aumento da resistência viscoplástica. Contudo, tal comparação é contestável, como se observa a seguir.

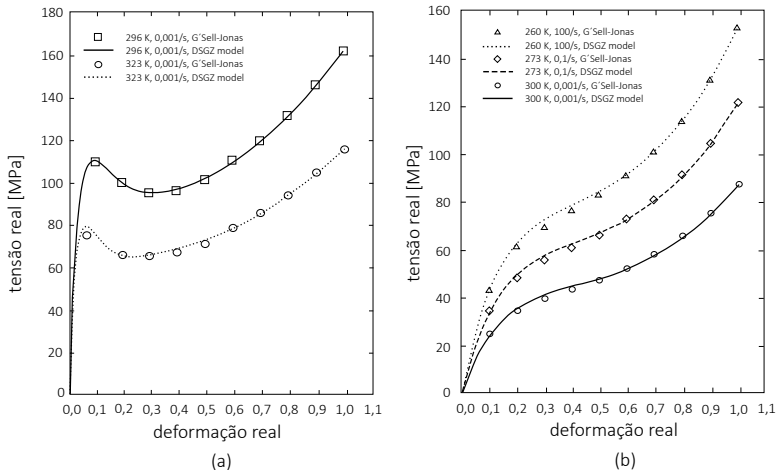


Figura 3.10: Comportamento mecânico (tração vs. deformação reais) de materiais (a) amorfos e (b) semicristalinos. Adaptado de [Duan et al. \(2001\)](#).

De acordo com [Callister \(2007\)](#), para materiais semicristalinos é possível observar que em um ensaio uniaxial, logo após ultrapassar o valor de tensão de escoamento superior, o corpo de prova apresenta uma deformação localizada caracterizada por uma estricção. Contudo, diferentemente dos metais, a estricção se propaga ao longo de todo o corpo de prova (Figura 3.11). Isso ocorre porque as cadeias poliméricas se orientam na direção do carregamento quando submetidas a grandes deformações, resultando em uma maior resistência local do material e assim permitindo que haja a propagação da estricção para as regiões adjacentes, menos resistentes ao fluxo viscoplástico. Por outro lado, alguns materiais poliméricos são frágeis e apresentam pouca ou nenhuma estricção.

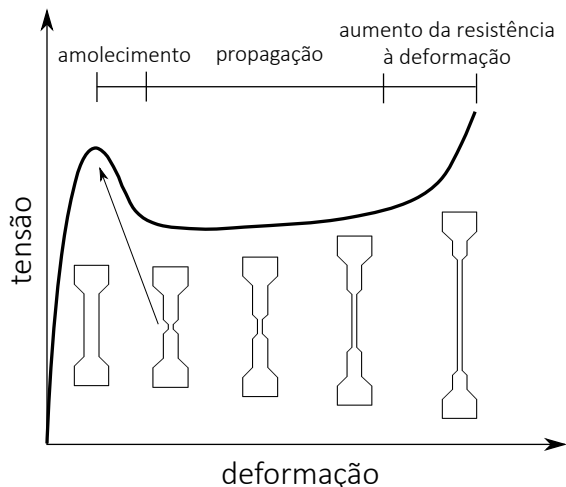


Figura 3.11: Comportamento esquemático da relação tensão-deformação de um polímero, bem como um exemplo do fenômeno de estricção e sua propagação em um corpo de prova.

Diferentes mecanismos de falha podem ser observados em polímeros. Os termoplásticos podem apresentar tanto fratura frágil quanto dúctil. Fatores que favorecem a fratura frágil são a redução de temperatura, aumento da taxa de deformação, presença de entalhes, espessura do componente e modificação da estrutura do polímero. Materiais vítreos são frágeis às baixas temperaturas, mas se tornam dúcteis quando próximos da temperatura de transição vítrea (T_g). Como consequência, podem apresentar deformação plástica antes da fratura. Um fenômeno comum que antecede a fratura em materiais termoplásticos vítreos é o microfissuramento (*crazing*), sendo esse resultado do escoamento localizado do material. Durante a deformação, surgem microvazios interligados por pontes fibrilares (fibrilas) que apresentam uma alta orientação das cadeias poliméricas (Figura 3.12). Essas pontes são capazes de suportar um certo nível de tensão e de absorverem parte da energia necessária à fratura. Porém, quando as fibrilas se rompem, fazem com que ocorra o coalescimento dos microvazios, o que progressivamente gera trincas no material.

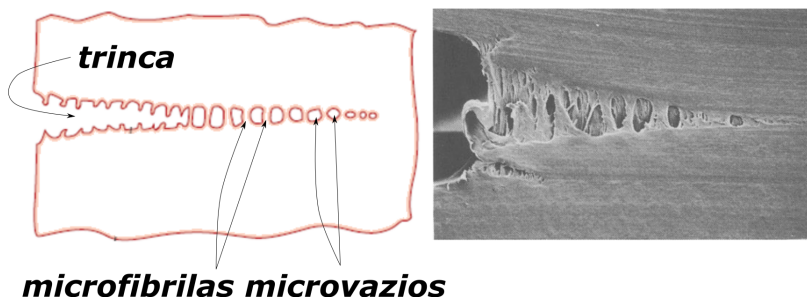


Figura 3.12: Ilustração de um microfissuramento em polímeros e a subsequente formação de uma trinca. Adaptado de [Callister \(2007\)](#), [Brown e Lu \(2000\)](#)

Como visto, são inúmeros os fatores que contribuem para a variedade de características e comportamentos associados aos polímeros. O texto acima é apenas uma pequena amostra dessa diversidade. Na próxima seção, algumas características adicionais relacionadas à degradação dos polímeros, mais especificamente dos polímeros biodegradáveis e bioabsorvíveis, serão apresentadas.

3.1.2 Polímeros bioabsorvíveis e hidrólise

Desde a década de 1960, os materiais sintéticos bioabsorvíveis têm sido aperfeiçoados e empregados em aplicações médicas. Atualmente sua utilização em procedimentos de ortopedia e traumatologia (ex. parafusos, fixadores etc.) tem sido bem aceita e em outras especialidades, como na área cardiovascular (ex. *stents*), possuem um grande potencial de desenvolvimento. Além disso, a utilização de materiais biodegradáveis e bioabsorvíveis não está limitada a aplicações médicas, sendo esses de grande importância em produtos e sistemas ecologicamente amigáveis, como mostra a Figura 3.13, na qual estão esquematicamente apresentadas as respectivas áreas de utilização de alguns materiais no que se refere a aplicações médicas ou ecológicas ([IKADA; TSUJI, 2000](#)).

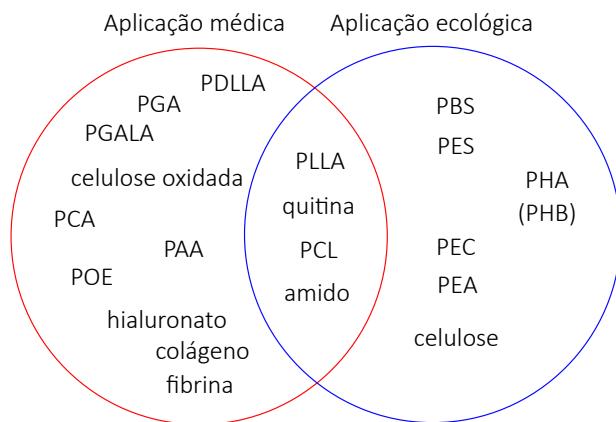


Figura 3.13: Aplicações médicas e ecológicas dos materiais biodegradáveis. Adaptado de Ikada e Tsuji (2000).

3.1.2.1 Hidrólise

Uma das características mais relevantes dos materiais biodegradáveis e dos bioabsorvíveis é associada ao fato desses materiais serem suscetíveis à degradação por hidrólise. De forma geral, a hidrólise consiste em um processo químico no qual ocorre a quebra de ligações moleculares na presença de água. Em polímeros do tipo poliésteres alifáticos, tais como PLA, PGA, PCL, entre outros, essa reação se dá devido à existência das ligações ésteres (Figura 3.14) na cadeia molecular desses materiais. No processo de hidrólise, a água entra em contato com a cadeia polimérica agindo sobre essas ligações e promovendo a cisão das mesmas, o que leva à formação de oligômeros e monômeros e, conseqüentemente, à redução do peso molecular do polímero. Observa-se também que a hidrólise pode resultar em condições locais de elevada acidez, o que acelera a própria taxa de hidrólise, isto é, tem-se, portanto, uma reação autocatalítica.

Quando a hidrólise ocorre em um componente polimérico implantado em um corpo vivo, os produtos provenientes das reações (ácidos monoméricos, como o ácido láctico) permanecem no organismo, ou são metabolizados e eliminados (Ciclo de Krebs¹) sem efeitos prejudiciais ao mesmo. Esse

¹Veja explicação, por exemplo, em Barbanti, Zavaglia e Duek (2005)

fato possibilita que componentes fabricados com base nesses polímeros, uma vez implantados e após ou enquanto cumprem sua função, sofram um processo progressivo de degradação de forma a serem absorvidos ou eliminados. Desta forma, reduz-se, por exemplo, a necessidade de uma intervenção cirúrgica posterior para remoção do implante. Nesse contexto, o uso de materiais poliméricos ainda traz benefícios em relação aos metálicos, tais como: a não interferência em procedimentos de radiografia e ressonância magnética; resistência mecânica compatível à recuperação óssea, reduzindo efeitos de fragilização e problemas relativos à remodelação; melhor adequação ao processo de liberação de medicamentos; a inexistência de íons metálicos, tal como ocorre com certos metais; etc.

3.1.2.2 Materiais bioabsorvíveis

Entre os vários tipos de materiais bioabsorvíveis, os polímeros poli(α -hidróxi ácidos) e seus copolímeros são considerados os de maior importância, porque em função das proporções dos monômeros utilizados em sua síntese é possível obter materiais com uma variada gama de propriedades mecânicas e diferentes taxas de degradação (MOTTA; DUEK, 2007). O polímero poli(ácido láctico), PLA, possui duas formas químicas, sendo essas o poli(L-ácido láctico), PLLA, e o poli(D-ácido láctico), PDLA. Na Figura 3.14 é possível ver os dois enantiômeros do ácido láctico. Ambas as configurações podem ainda ser combinadas dando origem a um copolímero com propriedades intermediárias, designado poli(L-co-D, L ácido láctico), PLDLA. A vantagem do PLDLA sobre seus homopolímeros reside no fato de suas propriedades mecânicas serem equivalentes às do PLLA, contudo com menor tempo de degradação. Nesse último caso, um fator proveniente do PDLA, o qual possui uma taxa de degradação menor que a do PLLA (MOTTA; DUEK, 2007).

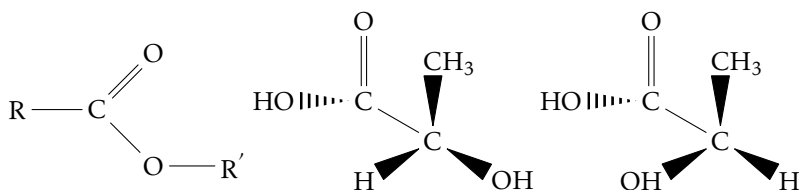


Figura 3.14: Função éster. Enantiômeros do ácido láctico: L- e D- ácido lácticos.

Aspectos importantes em relação ao processo de degradação dos materiais bioabsorvíveis e suas propriedades físicas são discutidos em inúmeros trabalhos. Nesse contexto, os textos de [Perego e Cella \(2010\)](#) e [Gleadall \(2015\)](#) são referências que trazem de forma concisa e abrangente informações sobre diversas características do comportamento termomecânico dos materiais bioabsorvíveis, tendo como base diversos resultados relatados na literatura. De forma geral, muitas das características dos materiais poliméricos biodegradáveis e dos bioabsorvíveis são as mesmas relacionadas a polímeros convencionais (veja Seção 3.1.1). Contudo, ressalta-se aqui alguns dos fatores que afetam os materiais biodegradáveis e os bioabsorvíveis. Entre esses fatores podemos citar:

- peso molecular;
- temperatura;
- pH do meio;
- processo de fabricação (obtenção do polímero; processo de injeção, compressão etc.; tratamento de recozimento (*annealing*), entre outros);
- tamanho e formato da amostra (corpo de prova, dispositivo)
- morfologia (cristalinidade, orientação das cadeias poliméricas, tamanho dos esferulitos);
- propriedades mecânicas iniciais;
- perda de massa do material, porosidade;
- temperatura de transição vítrea.

Devido aos variados aspectos que influenciam a resposta termomecânica e a degradação desses materiais, bem como a complexa natureza desses fenômenos, não é um fato que surpreende a diversidade e a grande dispersão de resultados encontrados na literatura. Todavia é possível identificar claramente alguns padrões, tendências e relações. Alguns desses aspectos são descritos a seguir com base no texto de [Gleadall \(2015\)](#).

Um dos fatores mais comumente associados à resposta termomecânica e à degradação dos polímeros é o seu peso molecular. Observa-se que, embora afirmado na Seção 3.1.1 que o peso molecular tenha pouca influência sobre o módulo elástico ([CALLISTER, 2007](#)), segundo [Gleadall \(2015\)](#), no caso dos

polímeros bioabsorvíveis, esse é um fator determinante tanto para o módulo quanto para a resistência do material. Assim, o módulo elástico e a resistência à tração de materiais como o PLA apresentam variações bastante evidentes à medida que o polímero se degrada, fato constatado em inúmeros resultados reportados na literatura e associado justamente à redução do peso molecular durante a degradação. Observa-se, contudo, que propriedades como rigidez e resistência podem tanto aumentar em uma fase inicial de degradação, seguida de uma redução acentuada, quanto podem ter seus valores reduzidos desde os primeiros instantes. A Figura 3.15 mostra algumas possíveis relações entre a variação do módulo de elasticidade e o peso molecular com base nos dados publicados por Gleadall (2015). A curva superior (tracejada) ilustra o caso em que ocorre inicialmente um aumento do módulo, enquanto a inferior (pontilhada) mostra o caso oposto em que desde os primeiros instantes há uma queda dos valores daquela propriedade (a linha contínua sugere um comportamento intermediário).

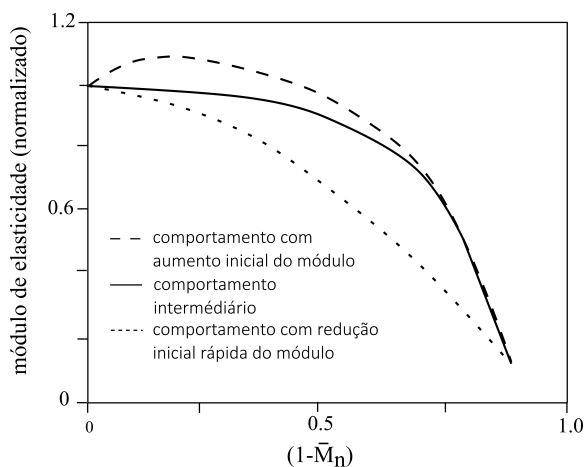


Figura 3.15: Algumas variações da relação entre o módulo de elasticidade normalizado e o peso molecular normalizado (\bar{M}_n). Adaptado de Gleadall (2015).

Juntamente com o peso molecular, o grau de cristalinidade dos polímeros tem influência direta sobre o comportamento dos mesmos. Via de regra, espera-se que com o aumento do grau de cristalinidade, o módulo elástico (rigidez) e a resistência do material também sejam maiores. Desta forma, como

a cisão das cadeias poliméricas pode elevar o grau de cristalinidade, seria esperado que a rigidez e a resistência aumentassem à medida que o material se degrada. Contudo, com o decaimento do peso molecular, deve ocorrer a redução dessas propriedades. Assim, supõe-se haver uma relação de predominância entre o aumento da cristalinidade e a redução do peso molecular sobre a dinâmica de degradação do material, o que justificaria uma elevação dos valores dessas propriedades em um primeiro instante com posterior redução no decorrer do processo de degradação.

Além do módulo de elasticidade e da resistência, outra propriedade usualmente empregada para caracterizar os polímeros é a deformação de ruptura do material. A redução do peso molecular devido à cisão das cadeias poliméricas durante o processo de degradação faz com que a deformação de ruptura seja menor. Contudo, a observação experimental desse fato parece ser ainda menos conclusiva que nos casos referentes ao módulo de elasticidade e à resistência. Trata-se de um conjunto muito vasto de fatores que afetam essa propriedade, mas conclui-se que a longo termo a deformação de ruptura diminuirá de valor à medida que o material se degrada. A observação desse fato pode ser de certa forma evidenciada, por exemplo, no trabalho de [Roesler et al. \(2014\)](#), no qual parafusos de fixação submetidos a ensaios de torção apresentam uma redução em sua deformação de ruptura à medida que o estado de degradação do material aumenta. No que se refere à relação entre grau de cristalinidade e deformação de ruptura, a princípio, espera-se que o aumento da cristalinidade resulte em um decaimento do valor dessa propriedade.

Além dos fatores já discutidos, outros também afetam a resposta termomecânica dos materiais bioabsorvíveis, entre esses, fatores geométricos e de escala. Experimentos mostram que espécimens de maiores dimensões podem se degradar mais rapidamente que aquelas de menor tamanho ([GLEADALL, 2015](#)). Em uma primeira análise, esse fato pode causar uma situação contraditória. Ao se projetar um dispositivo buscando uma maior rigidez e resistência, intuitivamente poderia se propor uma geometria com maiores dimensões, enquanto, devido ao processo de degradação, essa escolha eventualmente levaria a uma falha prematura em comparação a um dispositivo com dimensões inferiores e, portanto, supostamente menos robusto.

A orientação das cadeias, que ocorre por exemplo na fabricação de fios e fibras, também afeta a taxa de degradação do material. Assim, materiais com e sem orientação das cadeias apresentarão diferenças na evolução da degradação de suas propriedades.

A perda de massa resultante de efeitos erosivos também é outro fator que altera a resistência do material. Contudo, esse processo tende a ocorrer

já em uma etapa final da degradação, quando a funcionalidade estrutural da amostra ou dispositivo já estaria comprometida. Observa-se então que, nos materiais semicristalinos, o processo de hidrólise irá acontecer preferencialmente nas regiões amorfas. Em um primeiro instante, isso não afetará as propriedades físicas do polímero, uma vez que a parte cristalina mantém a coesão da matriz polimérica. Contudo, à medida que a degradação da matriz evolui, inicia-se a redução das propriedades do material. Nota-se que a redução do módulo elástico e da resistência seguem de forma qualitativa a mesma tendência de redução do peso molecular durante o processo de degradação. Comparando materiais inicialmente amorfos e inicialmente semicristalinos, tem-se que no caso dos materiais amorfos, esses apresentam um atraso no decaimento em relação ao peso molecular superior ao caso dos materiais semicristalinos (DUEK; ZAVAGLIA; BELANGERO, 1999; GLEADALL, 2015). O gráfico na Figura 3.16 ilustra a sequência e estágios em que se espera que as propriedades variem ao longo do tempo.

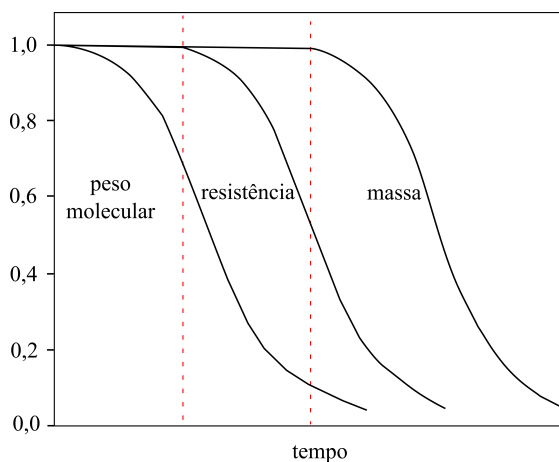


Figura 3.16: Sequência da evolução das propriedades. Adaptado de Pietrzak, Sarver e Verstyne (1997).

Além disso, pode-se caracterizar duas formas principais da evolução da degradação no material. A primeira é a degradação superficial que ocorre quando o processo de difusão da água é inferior à taxa de degradação. Sendo assim, as moléculas de água inicialmente na superfície não alcançam o interior do material. A segunda forma possível é a de degradação mássica

(homogênea), na qual a difusão da água acontece em uma escala de tempo muito inferior ao da degradação do material e, portanto, supõem-se que todo volume de material se degrade uniformemente (GöPFERICH, 1996; GöPFERICH; TESSMAR, 2002). Alguns trabalhos ainda relacionam uma outra possibilidade na qual, devido à alta concentração e baixa difusão no interior do material, fator que favorece o efeito autocatalítico da hidrólise, a região interna se degrada mais rapidamente que a região superficial (LI, 1999). A Figura 3.17 mostra esquematicamente a sequência de degradação do material respectivamente para os casos de: (a) degradação superficial, (b) degradação mássica interior, (c) degradação mássica (homogênea). Na presente proposta, adota-se como hipótese a condição de degradação mássica (homogênea).

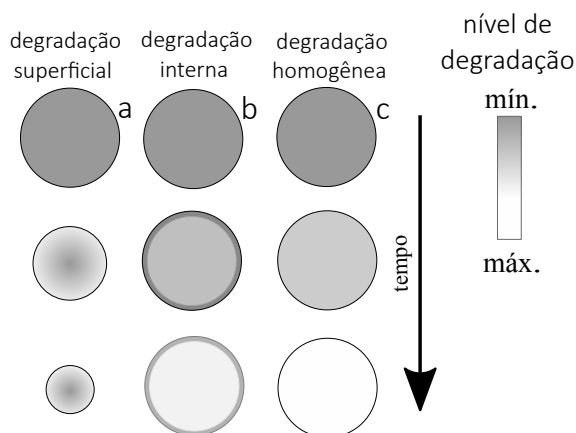


Figura 3.17: Sequência de degradação do material. (a) Degradação superficial, (b) degradação mássica interior, (c) degradação mássica (homogênea).

Ressalta-se ainda que resultados experimentais indicam que cargas estáticas, cíclicas bem como seus correspondentes níveis de deformação e/ou tensão aumentam a taxa de degradação do polímero. Podemos citar entre alguns estudos que inicialmente buscaram relacionar o processo de degradação com os estados de tensão e/ou deformação do material o trabalho de Miller e Williams (1984), no qual testes em fios de sutura fabricados em poli(ácido glicólico) (PGA) foram executados tanto *in vitro* quanto *in vivo* para diferentes níveis de deformação e degradação. Ou ainda, em estudo mais recente, Hayman et al. (2014) realizaram testes *in vitro*, tanto estáticos quanto dinâ-

micos, em fibras de PLLA, evidenciando a clara correlação entre o estado de solicitação mecânica do material e sua degradação hidrolítica.

3.2 MECÂNICA DO DANO CONTÍNUO

A existência ou a nucleação de microvazios e microtrincas em um sólido assim como suas respectivas evoluções (crescimento e coalescimento) podem ser interpretadas como fenômenos de dano, nos quais os materiais têm sua capacidade de suportar cargas progressivamente reduzida (de SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2008). Nas últimas cinco décadas, o ramo da Mecânica do Contínuo denominado Mecânica do Dano Contínuo (MDC) tem se desenvolvido com bastante sucesso. Ao se adotar a hipótese do contínuo, microvazios e microtrincas, isto é, descontinuidades relacionadas ao dano, são consideradas suficientemente pequenas quando comparadas às dimensões de um Elemento Representativo de Volume (ERV), de tal forma que todas as propriedades desse volume de material podem ser representadas por variáveis homogeneizadas (LEMAITRE, 1996; LEMAITRE J. ; DESMORAT, 2005).

Basicamente, o comportamento mecânico dos materiais pode ser analisado em três diferentes escalas: micro, macro e mesoescala. A microescala é aquela em que se espera que os mecanismos de deformação e dano se desenvolvam. A mesoescala é a escala para a qual as equações constitutivas são propostas. Finalmente, a macroescala corresponde à escala em que observamos as estruturas e componentes de engenharia (LEMAITRE, 1996). Mudanças nas propriedades do material podem ser observadas na mesoescala, ou seja, na escala de um ERV, ou ainda na microescala (escala da descontinuidades em um ERV). Tipo e taxa de carregamento, temperatura e condições do ambiente entre outros fatores influenciam os mecanismos que promovem a deformação e a degradação dos materiais. Assim, variações das propriedades na micro e na macroescala podem ser tomadas como função do tipo de carregamento e mecanismos de falha. O processo de danificação está intimamente relacionado ao mecanismo de deformação de cada material. Como extensamente discutido nas obras de Lemaitre (1996), Lemaitre J. ; Desmorat (2005), os mecanismos de falha são classificados como: falha por dano dúctil, dano frágil, dano por fluência, dano por fadiga de baixo ciclo e dano por fadiga de alto ciclo. Nesta tese, como será apresentado no Capítulo 4, no que diz respeito à parcela de contribuição das deformações plásticas na danificação total do material, consideraremos o mecanismo de dano dúctil.

No tocante à descrição matemática do fenômeno de dano contínuo,

tem-se como a primeira tentativa de abordagem do problema aquela introduzida por Kachanov em 1958 (de SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2008). Kachanov propôs a utilização de uma variável escalar que caracterizava o estado de danificação em um modelo para fluência uniaxial. Posteriormente, em 1963, Rabotnov introduz o conceito de área efetiva, dando assim um significado físico para a proposta de Kachanov. Rabotnov sugeriu que o desenvolvimento de microvazios e microtrincas resulta na redução de área onde forças atuam. Então, baseado nessa proposição, uma variável de dano escalar foi definida como

$$d = \frac{A_0 - A}{A_0}, \quad (3.1)$$

sendo A_0 correspondente à área original sem vazios e A a área relacionada ao material danificado, tal como ilustrado na Figura 3.18. O valor 0 (zero) é atribuído ao material sem danificação, enquanto 1 (um) corresponde àquele totalmente danificado. Além disso, Kachanov substitui na equação constitutiva para fluência uniaxial o valor de tensão real σ pela tensão efetiva $\tilde{\sigma}$ (de SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2008), sendo ambos os valores relacionados por

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - d}. \quad (3.2)$$

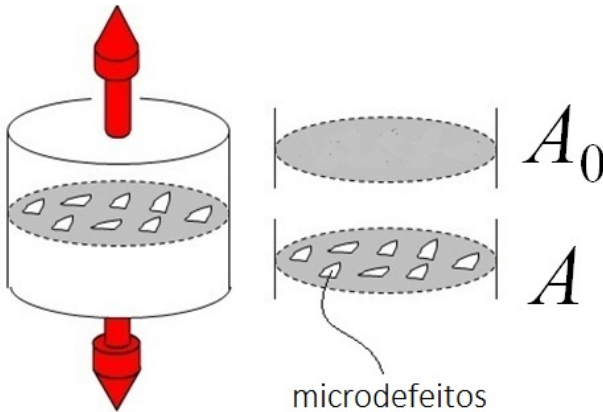


Figura 3.18: Definição de área efetiva. Área sem dano (A_0) e área com danificação (A).

Outro importante conceito, esse introduzido por Lemaitre, foi o da hipótese de deformação equivalente. Essa hipótese afirma que o comportamento de um material danificado submetido a uma deformação pode ser representado pelas mesmas leis constitutivas estabelecidas para um material íntegro (sem dano), para isso, bastando substituir a tensão real pela tensão efetiva (LEMAITRE, 1996; de SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2008). Observa-se, no entanto, que outras formas de equivalência também são possíveis, por exemplo, as hipóteses de tensão equivalente (SIMO; JU, 1987) e de energia equivalente (elástica ou total) (CORDEBOIS; SIDOROFF, 1982; CHOW; LU, 1992). Uma comparação entre essas hipóteses é apresentada por (SKRZYPEK; GANCZARSKI, 1999). Embora alguns autores advoquem ser a equivalência em energia a opção mais adequada (SKRZYPEK; GANCZARSKI, 1999), no presente trabalho empregaremos a hipótese de deformação equivalente por sua simplicidade de adequação à formulação desenvolvida.

Além dos modelos associados à proposta de Lemaitre, outras formulações são encontradas na literatura, tal como a de Gurson para materiais porosos. Nessa classe de modelos, a variável de dano está associada intrinsecamente ao crescimento de vazios devido à ação mecânica. A correspondente variável interna é definida como a fração volumétrica desses vazios em uma matriz (GURSON, 1977; TVERGAARD, 1987; ZHANG, 1995b; ZHANG, 1995a). Deve-se observar no entanto, que muitos autores argumentam que tais modelos baseados na fração volumétrica de vazios não fazem parte da mecânica do dano contínuo, pois não satisfazem certos fundamentos termodinâmicos (veja, por exemplo, Santaoja e Talja (2000)). Ambas as famílias de modelos (Lemaitre e Gurson) são caracterizadas por variáveis escalares e aplicam-se à condição de dano isotrópico, contudo, muitos dos conceitos são estendidos a formulações para casos como os de dano anisotrópico, com dependência à tensão volumétrica, abertura e fechamento de trincas etc.

A Figura 3.19 ilustra um caso de aplicação da MDC na obtenção de um campo escalar de dano em um teste de tração uniaxial de uma chapa em aço baixo-carbono (largura 12.9 mm, espessura 0.9 mm) e a fratura observada experimentalmente.

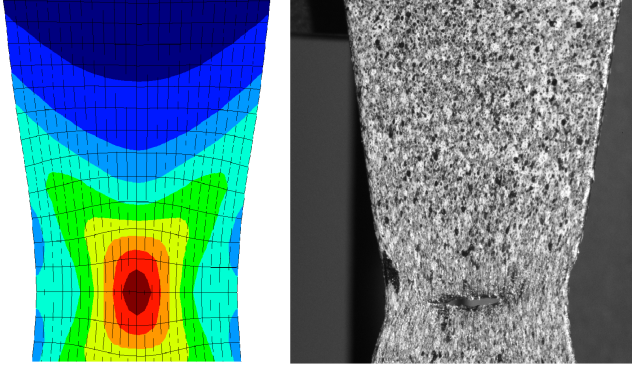


Figura 3.19: Exemplo de aplicação da MDC. Comparação do campo de dano estimado computacionalmente com o modelo de Lemaitre e a ocorrência de trinca observada em experimento (CASTRO, 2012).

Na proposta que é apresentada no Capítulo 4, a evolução do dano plástico segue em essência o modelo de Lemaitre. Em sua versão simplificada, na qual apenas o encruamento isotrópico é considerado, o potencial de fluxo adotado por Lemaitre, Equação (3.3), é formado por uma parcela proveniente da função de escoamento Φ e outra associada ao processo de danificação. Essa segunda parcela é dependente funcionalmente da força termodinâmica Y , conjugada à variável de dano, sendo tal parcela descrita por uma lei de potência em relação à Y , isto é

$$\Psi = \Phi + \frac{N}{(1-d)(S+1)} \left(\frac{-Y}{N} \right)^{S+1}, \quad (3.3)$$

Como consequência da escolha desse potencial, tem-se a lei de evolução para o dano dada por

$$\dot{d} = \dot{\gamma} \frac{\partial \Psi}{\partial (-Y)} = \frac{\dot{\gamma}}{1-d} \left(\frac{-Y}{N} \right)^S, \quad (3.4)$$

sendo S , N constantes relacionadas ao material e $\dot{\gamma}$ um multiplicador de Lagrange.

A proposta de um potencial de dano como uma função de potência condiz com observações experimentais que sugerem uma relação não linear

para esse potencial com a variável Y (LEMAITRE J. ; DESMORAT, 2005), além de ser compatível com modelos empíricos que descrevem a evolução de dano em casos como o de fratura frágil, dúctil, por fadiga e fluência (LEMAITRE, 1985a, 1985b, 1996). Por se tratar de uma proposição abrangente, a escolha de um potencial com as mesmas características pode ser considerada como uma opção razoável para uma abordagem que inclua diversos tipos de materiais, inclusive materiais poliméricos.

3.3 TERMOMECAÂNICA DO CONTÍNUO

Nesta seção, descreveremos brevemente alguns princípios da termomecânica do contínuo com o objetivo de formalizar contextualmente alguns conceitos fundamentais e estabelecer uma notação apropriada.

Conservação de massa

Considere um corpo \mathcal{B} que ocupa uma região aberta do espaço Ω , limitada por um contorno Γ . O princípio da conservação de massa pode então ser expresso para qualquer ponto material do corpo \mathcal{B} por meio da equação

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} = 0, \quad (3.5)$$

na qual ρ representa a massa específica, \mathbf{u} é o vetor deslocamento e $\nabla \cdot (\bullet)$ é o operador divergência. A Equação (3.5) é usualmente denominada como a equação da continuidade. O significado físico dessa equação é interpretado por Malvern (1969, p. 207) que afirma ser o divergente do vetor velocidade a medida do fluxo de material que sai de uma partícula e que se iguala à taxa unitária do decrescimento da densidade na vizinhança da mesma.

Balanco de momento

Em sua configuração deformada (espacial) e para qualquer ponto do corpo \mathcal{B} , o balanço de momento, tanto linear quanto angular, pode ser expresso em termos do tensor de tensões de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ por meio das seguintes

equações diferenciais e condições de contorno:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \rho \ddot{\mathbf{u}} \text{ em } \Omega , \quad (3.6a)$$

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \text{ em } \Gamma , \quad (3.6b)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T , \quad (3.6c)$$

sendo \mathbf{b} o vetor força de corpo, \mathbf{n} um vetor unitário normal à superfície deformada e \mathbf{t} um vetor força por unidade de área, o qual chamaremos de vetor trativo. A Equação (3.6a) é chamada de equação do movimento de Cauchy (MALVERN, 1969) e a simetria de $\boldsymbol{\sigma}$ em (3.6c) é consequência do balanço do momento angular.

Primeira lei da termodinâmica

Esse princípio rege a conservação da energia em um sistema físico, isto é, estabelece que a soma da potência mecânica e do calor que entram no sistema será igual à taxa da variação total da energia do mesmo. A potência de entrada será aquela correspondente à potência produzida por uma força externa por unidade de área (vetor trativo) mais a potência resultante das forças de corpo atuando sobre \mathcal{B} . A entrada de calor será dada pelo calor conduzido através da fronteira Γ e do calor produzido por uma fonte de calor interna em \mathcal{B} . Desta forma, para qualquer ponto de \mathcal{B} , teremos

$$\dot{u} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + r - \nabla \cdot \mathbf{q} , \quad (3.7)$$

na qual u é a energia interna por unidade de volume, \mathbf{D} é o tensor taxa de deformação, $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}$ é a potência das tensões por unidade de volume na configuração deformada de um corpo, r é a o calor produzido por unidade de volume e \mathbf{q} é o vetor fluxo de calor.

Segunda lei da termodinâmica

Esse princípio, o qual está diretamente relacionado à irreversibilidade de processos dissipativos, postula que, em um corpo \mathcal{B} , a taxa de variação da entropia é sempre maior ou igual à taxa de entrada de entropia, quantificada como o fluxo de calor por unidade de temperatura que ingressa no sistema no qual tal troca acontece (MALVERN, 1969). A forma local desse postulado é

dada pela seguinte desigualdade

$$\dot{s} + \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{q}}{T} \right] - \frac{r}{T} \geq 0, \quad (3.8)$$

que é válida para qualquer ponto de \mathcal{B} , sendo s a entropia por unidade de volume e T a temperatura absoluta.

Desigualdade de Clausius-Duhem

Combinando o primeiro e o segundo princípios, obtemos a desigualdade

$$\dot{s} + \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{q}}{T} \right] - \frac{1}{T} (\dot{u} - \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} + r + \nabla \cdot \mathbf{q}) \geq 0. \quad (3.9)$$

Então, introduzindo em (3.9) a energia livre de Helmholtz W , dada por

$$W = u - Ts, \quad (3.10)$$

e a identidade

$$\nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{q}}{T} \right] = \frac{1}{T} \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{T^2} \mathbf{q} \cdot \nabla T, \quad (3.11)$$

obtém-se a desigualdade de Clausius-Duhem:

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - (\dot{W} + s\dot{T}) - \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T \geq 0. \quad (3.12)$$

Tendo em vista que, devido à Lei de Fourier, o último termo à direita da desigualdade é sempre não negativo (calor flui das partes mais quentes para as mais frias do corpo), isto é,

$$-\mathbf{q} \cdot \nabla T \geq 0, \quad (3.13)$$

obtém-se a desigualdade de Clausius-Planck:

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - (\dot{W} + s\dot{T}) \geq 0. \quad (3.14)$$

Finalmente, se consideramos que o processo analisado é isotérmico, \dot{T} é nulo e a desigualdade toma a forma

$$\mathcal{D} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} - \dot{W} \geq 0, \quad (3.15)$$

na qual \mathcal{D} define a potência dissipada, sendo essa contabilizada como a diferença entre a potência produzida pelas tensões diminuída da variação de

energia livre. Essa desigualdade terá papel importante na imposição de restrições nos modelos constitutivos que descrevem o estado de tensão bem como sua dependência em relação às variáveis de estado e suas taxas.

3.4 FORMULAÇÃO VARIACIONAL

Ainda com o objetivo de apresentar alguns conceitos essenciais e a notação necessária para entendimento do modelo descrito no Capítulo 4, aspectos gerais da estrutura estabelecida em [Ortiz e Stainier \(1999\)](#) são mostrados a seguir.

Considere $\mathcal{E} = \{\mathbf{F}, \mathbf{Z}\}$ um conjunto de variáveis de estado no qual \mathbf{F} é o gradiente de deformação e \mathbf{Z} é uma representação geral de variáveis internas (escalar, vetorial, tensorial) relacionadas a processos dissipativos. Considere também que a energia livre de Helmholtz W depende de \mathcal{E} , de forma que

$$W = W(\mathcal{E}), \quad \mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}, \quad \mathbf{Q} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Z}}, \quad (3.16)$$

sendo \mathbf{P} o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff e \mathbf{Q} forças termodinâmicas conjugadas à \mathbf{Z} . Desprezando os efeitos térmicos, a dissipação mecânica \mathcal{D} é dada pela diferença entre a potência produzida pela tensão e a taxa da energia livre ([GURTIN; FRIED; ANAND, 2010](#)):

$$\mathcal{D} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{W} = -\mathbf{Q} * \dot{\mathbf{Z}} \geq 0, \quad (3.17)$$

sendo $*$ a representação de uma operação produto adequada aos termos. Uma forma efetiva de se satisfazer a desigualdade (3.17) é considerar a existência de um potencial $\phi = \phi(\mathbf{Q}; \mathcal{E})$ que seja convexo, não negativo e de valor zero na origem, de forma que $-\dot{\mathbf{Z}} \in \partial\phi(\mathbf{Q})$, sendo $\partial\phi(\mathbf{Q})$ o conjunto de subdiferenciais relacionados a $\phi(\mathbf{Q})$. Pelas propriedades associadas à convexidade de ϕ , existirá uma função convexa conjugada ϕ^* para a qual

$$\phi^* = \sup \{-\dot{\mathbf{Z}} * \mathbf{Q} - \phi(\mathbf{Q})\}, \quad \mathbf{Q} \in \partial\phi^*(-\dot{\mathbf{Z}}), \quad (3.18)$$

sendo ϕ^* a transformada de Legendre-Fenchel de ϕ . Caso ϕ^* seja Fréchet diferenciável, o conjunto $\partial\phi^*(-\dot{\mathbf{Z}})$ se reduz a um único elemento, $\mathbf{Q} = -\frac{\partial\phi^*(-\dot{\mathbf{Z}})}{\partial\dot{\mathbf{Z}}}$, o que permite escrever a seguinte igualdade, representando a equação de evo-

lução das variáveis internas:

$$\frac{\partial W(\mathbf{Z})}{\partial \mathbf{Z}} + \frac{\partial \phi^*(\dot{\mathbf{Z}})}{\partial \dot{\mathbf{Z}}} = 0 . \quad (3.19)$$

Uma forma alternativa de se definir as equações de estado (3.16) é dada pelas seguintes funções potenciais

$$\mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{Z}}; \mathcal{E}) = \dot{W}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{Z}}; \mathcal{E}) + \phi^*(\dot{\mathbf{Z}}; \mathcal{E}) = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Z}} * \dot{\mathbf{Z}} + \phi^*(\dot{\mathbf{Z}}; \mathcal{E}), \quad (3.20)$$

$$\bar{\mathcal{P}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) = \inf_{\dot{\mathbf{Z}}} \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{Z}}; \mathcal{E}) . \quad (3.21)$$

Pode-se verificar que as condições de otimalidade do problema (3.21) levam à equação de evolução (3.19), enquanto a derivada parcial de $\bar{\mathcal{P}}$ em relação à $\dot{\mathbf{F}}$ resulta na equação de estado

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\partial \bar{\mathcal{P}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E})}{\partial \dot{\mathbf{F}}} . \quad (3.22)$$

Em outras palavras, o potencial efetivo $\bar{\mathcal{P}}$, isto é, \mathcal{P} avaliado na variável minimizante $\dot{\mathbf{Z}}$, faz o papel de um potencial para \mathbf{P} em termos do argumento $\dot{\mathbf{F}}$. Uma forma convencional de se obter as leis constitutivas incrementais de um problema é dada por meio de procedimentos de integração no tempo de suas correspondentes equações na formulação para o contínuo. Contudo, dentro da presente abordagem, as respectivas atualizações incrementais são obtidas por meio de um processo de extremização. Para tal, os seguintes potenciais incrementais são definidos

$$\mathcal{W}(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}; \mathcal{E}_n) = W(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}) - W(\mathbf{F}_n, \mathbf{Z}_n) + \Delta t \phi^*(\mathbf{Z}_{n+1}; \mathcal{E}_n) , \quad (3.23)$$

$$\bar{\mathcal{W}}(\mathbf{F}_{n+1}; \mathcal{E}_n) = \inf_{\mathbf{Z}_{n+1}} \mathcal{W}(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{Z}_{n+1}; \mathcal{E}_n) . \quad (3.24)$$

De forma similar ao caso de $\bar{\mathcal{P}}$ em (3.21), a minimização em (3.24) resulta em uma expressão incremental para a equação de evolução:

$$\frac{\partial W_{n+1}}{\partial \mathbf{Z}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \phi^*(\mathbf{Z}_{n+1})}{\partial \mathbf{Z}_{n+1}} = 0 . \quad (3.25)$$

Adicionalmente, a derivada parcial de $\bar{\mathcal{W}}(\mathcal{E}_{n+1})$ em relação a \mathbf{F}_{n+1} resulta na forma discreta para a atualização constitutiva da tensão (ORTIZ; STAINIER, 1999):

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{\partial \bar{\mathcal{W}}}{\partial \mathbf{F}_{n+1}}, \quad (3.26)$$

que pode ser escrita de forma alternativa em termos do tensor de deformações de Cauchy-Green à direita \mathbf{C}_{n+1} , resultando no segundo tensor de tensões de Piola-Kirchhoff

$$\mathbf{S}_{n+1} = 2 \frac{\partial \bar{\mathcal{W}}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}. \quad (3.27)$$

Pode-se demonstrar que tais expressões incrementais são definidas de forma consistente, no sentido que as mesmas convergem para as equações contínuas em taxa, uma vez que o incremento no tempo tenda a zero.

Considerando que as equações constitutivas e as de compatibilidade são satisfeitas, o problema de equilíbrio pode ser posto como a minimização de um potencial de energia total incremental na configuração indeformada Ω_0 com contorno Γ_0 :

$$\mathbf{x}_{n+1}^* = \arg \min_{\mathbf{x}_{n+1} \in \mathcal{K}} \mathcal{H}(\mathbf{x}_{n+1}), \quad (3.28)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}_{n+1}) = \int_{\Omega_0} \bar{\mathcal{W}}(\mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1})) \, d\Omega_0 - \left[\int_{\Omega_0} \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{x}_{n+1} \, d\Omega_0 + \int_{\Gamma_0} \mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{x}_{n+1} \, d\Gamma_0 \right], \quad (3.29)$$

sendo \mathbf{b}_0 , \mathbf{f}_0 respectivamente forças de corpo e de superfície na configuração de referência e \mathcal{K} o conjunto de deformações admissíveis. Condições necessárias de otimalidade levam então ao Princípio dos Trabalhos Virtuais (PTV),

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{P}_{n+1} : \nabla \delta \mathbf{x} \, d\Omega_0 - \left[\int_{\Omega_0} \mathbf{b}_0 \cdot \delta \mathbf{x} \, d\Omega_0 + \int_{\Gamma_0} \mathbf{f}_0 \cdot \delta \mathbf{x} \, d\Gamma_0 \right] = 0, \quad \forall \delta \mathbf{x} \in \mathcal{V}, \quad (3.30)$$

sendo \mathcal{V} o conjunto de deformações virtuais.

Uma vez descritos os fundamentos da formulação, apresenta-se a seguir no Capítulo 4 uma aplicação direta dessa estrutura variacional. Descreve-se então o caso de um modelo constitutivo apropriado à representação do comportamento de materiais com características elasto-viscoplásticas sujeitos a um processo de danificação induzido por solicitações de natureza mecânica e química (hidrolítica) acopladas.

4 FORMULAÇÃO DO MODELO DE DANO DÚCTIL-HIDROLÍTICO

Inicialmente, antes de nos atermos à formulação matemática do problema constitutivo, algumas considerações devem ser feitas. O modelo aqui adotado para as relações viscoplásticas segue aquele descrito em [Brassart e Stainier \(2012\)](#), isto é, emprega-se o formato tradicional de uma função de dissipação baseada no modelo de Perzyna. Os termos relacionados à formulação do dano dúctil são combinados de forma a aproximar o formato clássico do modelo de Lemaitre ([LEMAITRE, 1996](#); [LEMAITRE J. ; DESMORAT, 2005](#)), considerando um processo de danificação de natureza isotrópica por meio de uma variável de dano escalar. Além disso, o modelo fundamenta-se na hipótese de deformação equivalente e de forças termodinâmicas efetivas. Ressalta-se que modelos tais como o de Lemaitre possuem limitações relacionadas à representação do dano nos casos para os quais o estado de tensões compressivas seja predominante. Possíveis correções de tal deficiência não fazem parte da atual proposta.

Em termos relativos à degradação química, parte-se do princípio que efeitos difusivos associados ao fluido responsável pela degradação do material ocorrem em escala de tempo muito inferior ao processo de danificação propriamente. Sendo assim, na presente formulação não se considera os respectivos efeitos associados à difusão. Embora tal hipótese possa trazer certas limitações à aplicação do modelo, em um grande número de casos a mesma não será impeditiva, por exemplo, quando as dimensões do componente a ser avaliado são relativamente pequenas (stents, parafusos, âncoras, pinos, fio de sutura etc.). De forma geral, o modelo de evolução de degradação hidrolítica assim como o acoplamento de dano dúctil-hidrolítico são similares àquele proposto por [Fancello et al. \(2014\)](#) para deformações infinitesimais. Todos os aspectos acima mencionados são definidos então dentro da estrutura variacional estabelecida por [Ortiz e Stainier \(1999\)](#) e [Radovitzky e Ortiz \(1999\)](#), como apresentado a seguir.

É importante, contudo, destacar que a proposta detalhada a seguir é baseada em uma formulação local de dano e, portanto, sujeita às conhecidas dificuldades causadas por tal tipo de abordagem (ex. dependência à malha etc.) ([NEEDLEMAN, 1988](#); [MURAKAMI](#); [KAWAI](#); [RONG, 1988](#); [MURAKAMI](#); [LIU, 1995](#)). Com o objetivo inicial de se estudar as potencialidades dos acoplamentos pretendidos, a presente proposta foi elaborada com ciência de tal limitação. Destaca-se, por outro lado, que alternativas como as apresentadas em [Moës et al. \(2010\)](#), [Bernard, Moës e Chevaugeon \(2012\)](#), [Stolz](#)

e Moës (2012) e Selke (2016) permitem o controle de localizações mediante técnicas externas ao modelo constitutivo, e consequentemente o uso de modelos locais sem as patologias mencionadas. Finalmente, a extensão dos resultados aqui obtidos para modelos intrinsecamente não locais (PEERLINGS et al., 2001; LEMAITRE J. ; DESMORAT, 2005) é passível de trabalhos futuros. Cabe ainda mencionar que formulações baseadas em modelos viscoplásticos, tal como a atual, podem eventualmente amenizar os efeitos negativos relativos a uma formulação local (NIAZI; WISSELINK; MEINDERS, 2012).

4.1 FORMULAÇÃO PARA O CONTÍNUO

Considerando uma formulação em uma estrutura cinemática para deformações finitas, emprega-se aqui a clássica decomposição multiplicativa de Kröner-Lee para o tensor gradiente de deformação, $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$. O tensor gradiente de deformação plástico \mathbf{F}^p é considerado como isocórico e o gradiente de velocidade, $\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}$, é separado em suas respectivas contribuições elástica e plástica:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{F}^e \mathbf{L}^p (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad \mathbf{L}^e \equiv \dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad \mathbf{L}^p \equiv \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1}. \quad (4.1)$$

O tensor elástico \mathbf{F}^e é decomposto em suas parcelas isocórica $\hat{\mathbf{F}}^e$ e volumétrica \mathbf{F}^v , fornecendo assim o tensor elástico isocórico de Cauchy-Green à direita $\hat{\mathbf{C}}^e$:

$$\mathbf{F}^e = \hat{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^v, \quad \hat{\mathbf{F}}^e = J^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F}^e, \quad \mathbf{F}^v = J^{\frac{1}{3}} \mathbf{I}, \quad \hat{\mathbf{C}}^e = \hat{\mathbf{F}}^e{}^T \hat{\mathbf{F}}^e, \quad (4.2)$$

sendo $J = \det \mathbf{F}$ e \mathbf{I} o tensor identidade de segunda ordem.

Considera-se que o modelo é dependente do seguinte conjunto de variáveis de estado:

$$\mathcal{E} = \{\mathbf{F}, \mathbf{F}^p, \alpha, d^p, d^h\}, \quad (4.3)$$

Nesse conjunto são incluídos os tensores gradiente de deformação \mathbf{F} e plástico \mathbf{F}^p assim como a variável interna escalar α , que consiste em uma medida da deformação plástica acumulada. As variáveis internas de dano dúctil d^p e hidrolítico d^h merecem comentários à parte. No presente contexto, a variável escalar de dano dúctil d^p deve ser considerada como uma medida de perda de propriedades mecânicas originadas pelo processo de deformação inelástica no meio. No caso de metais ela é comumente relacionada ao crescimento progressivo de microvazios e microtrincas. No caso de polímeros, esse dano

é frequentemente relacionado à ruptura de cadeias e ligações químicas devido à existência de escoamento inelástico entre as macromoléculas. O processo de degradação hidrolítica, por outro lado, afeta propriedades macroscópicas do material de forma similar à danificação de origem mecânica: rigidez elástica, limite de escoamento, características de resistência ao fluxo de deformações são visivelmente modificadas em decorrência do fenômeno de degradação química. Assim, mesmo que degradações de origem mecânica e química venham a acontecer em escalas diferentes na microestrutura do material, no presente caso, seus efeitos macroscópicos serão modelados por variáveis de dano contínuo, permitindo que de forma aditiva essas variáveis definam o estado de dano (ou degradação macroscópica) total d :

$$d = d^p + d^h, \quad d \leq 1. \quad (4.4)$$

Define-se então um potencial de energia livre W linearmente dependente em relação à variável de dano total d , podendo esse potencial ser decomposto aditivamente em suas contribuições elástica isocórica W^e , plástica W^p e volumétrica elástica U , assim

$$W = (1 - d) [W^e(\hat{\mathbf{C}}^e) + W^p(\alpha) + U(J)]. \quad (4.5)$$

É importante notar que, tal como em [Kintzel e Mosler \(2010\)](#), [Kintzel, Khan e Mosler \(2010\)](#), [Kintzel e Mosler \(2011\)](#), todos os termos da energia livre de Helmholtz, tanto parcelas elásticas quanto plásticas, são multiplicados pela variável de dano total, uma abordagem que se diferencia da forma clássica do modelo de Lemaitre. Assim, a influência do dano sobre o potencial plástico resulta em uma progressiva redução da capacidade do material em resistir a deformações plásticas.

Uma vez definidos os argumentos da função da energia livre, partindo da desigualdade (3.17) e empregando o procedimento de Coleman-Noll, obtém-se as seguintes forças conjugadas:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}, \quad \chi = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^p}, \quad \kappa = \frac{\partial W}{\partial \alpha}, \quad (4.6)$$

$$-Y^p = \frac{\partial W}{\partial d^p}, \quad -Y^h = \frac{\partial W}{\partial d^h}, \quad (4.7)$$

nas quais, devido à definição da variável de dano total, Equação (4.4), tem-se

$$Y^p = Y^h = Y = -\frac{\partial W}{\partial d} = W^e(\hat{\mathbf{C}}^e) + W^p(\alpha) + U(J). \quad (4.8)$$

Em outras palavras, a variável Y quantifica a energia livre total que seria armazenada pelo material não danificado para um dado histórico de deformação.

Duas restrições são impostas às variáveis internas. A primeira relaciona \mathbf{F}^p à α por meio de uma parametrização não holonômica (ORTIZ; STANIER, 1999)

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = \dot{\alpha} \mathbf{M}, \quad (4.9)$$

$$\dot{\alpha} \geq 0, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{M} \in \mathcal{K}_M = \left\{ \mathbf{N} \in \text{Sim.}; \mathbf{N} : \mathbf{N} = \frac{3}{2}; \mathbf{N} : \mathbf{I} = 0 \right\}, \quad (4.11)$$

sendo $\mathbf{L}^p = \mathbf{D}^p + \mathbf{W}^p$, \mathbf{D}^p a taxa de deformação plástica e para qual é empregada a hipótese de tensor de vorticidade plástico nulo, $\mathbf{W}^p = 0$. A variável escalar $\dot{\alpha} \geq 0$ é tomada como uma medida da amplitude de alongamento (amplitude do tensor taxa de deformação plástica), enquanto o tensor \mathbf{M} define uma direção para \mathbf{D}^p . A segunda restrição não holonômica associa α ao dano plástico d^p por meio da seguinte lei de evolução:

$$\dot{d}^p = \dot{\alpha} \frac{Y^S}{N}, \quad (4.12)$$

sendo S e N constantes de material. Nota-se que essa equação nada mais é que uma versão alternativa para a lei de evolução do dano dúctil de Lemaitre, aparecendo em outros trabalhos anteriores como Kintzel e Mosler (2010), Kintzel, Khan e Mosler (2010), Kintzel e Mosler (2011). Observa-se também que as Equações (4.9) e (4.12) reduzem o número de variáveis de estado independentes do problema, uma vez que a evolução de \mathbf{F}^p e d^p resultam dessas equações. No presente contexto variacional, essas equações são consideradas então como restrições não holonômicas de igualdade.

De acordo com a estrutura descrita na Seção 3.4, faz-se necessária a definição de uma função de dissipação ϕ^* . Sendo assim, para a proposta atual, considera-se ϕ^* como sendo formada respectivamente pelas contribuições referentes à dissipação viscoplástica, ao dano dúctil e ao dano químico:

$$\phi^* = \psi_{vp}^* + \varphi_{dp}^* + \varphi_{dh}^*. \quad (4.13)$$

O potencial viscoplástico ψ_{vp}^* é aquele associado à função de Perzyna:

$$\psi_{vp}^* = \begin{cases} (1-d)\sigma_Y\dot{\alpha} + \frac{cf_A(\alpha)}{\eta+1}\left(\frac{\dot{\alpha}}{c}\right)^{\eta+1} & \text{se } \dot{\alpha} \geq 0 \\ +\infty & \text{se } \dot{\alpha} < 0 \end{cases}, \quad (4.14)$$

sendo σ_Y a tensão limite de escoamento inicial, $f_A(\alpha)$ uma função associada com a saturação viscoplástica do material (CHABOCHE, 2008), η e c constantes do material.

No caso da parcela associada ao dano plástico dúctil, a função de dissipação φ_{dp}^* é dada por

$$\varphi_{dp}^* = \begin{cases} d^p Y = \dot{\alpha} \frac{Y^{S+1}}{N} & \text{se } \dot{\alpha} \geq 0 \\ +\infty & \text{se } \dot{\alpha} < 0 \end{cases}. \quad (4.15)$$

Finalmente, a dissipação referente à degradação hidrolítica φ_{dh}^* tem a forma

$$\varphi_{dh}^* = \begin{cases} \frac{R}{2(1-d)^n(Y+g)^{m-1}} (\dot{d}^h)^2 - g \dot{d}^h & \text{se } \dot{d}^h \geq 0 \\ +\infty & \text{se } \dot{d}^h < 0 \end{cases}, \quad (4.16)$$

sendo R , m , g constantes do material. Esse potencial de dissipação, no caso da formulação em sua forma contínua (em taxas), permite recuperar a mesma lei de evolução de dano hidrolítico proposta por Fancello et al. (2014).

Todas as três funções de dissipação penalizam taxas negativas de $\dot{\alpha}$ e \dot{d}^h . Como frequentemente acontece, a motivação para o uso de formas específicas dos potenciais pode não ficar evidente pela simples observação de suas respectivas expressões, mas sim por meio de suas derivadas (variações), uma vez que essas fornecem as leis de evolução do problema.

Neste ponto, como já mencionado, cabe ressaltar que são utilizadas as seguintes definições de forças termodinâmicas efetivas:

$$\tilde{\mathbf{P}} = \frac{\mathbf{P}}{(1-d)}, \quad \tilde{\chi} = \frac{\chi}{(1-d)}, \quad \tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{(1-d)}. \quad (4.17)$$

Empregando-se (4.5) e 4.13, assim como (4.14), (4.15) e (4.16), os pseudo-potenciais \mathcal{P} e $\bar{\mathcal{P}}$ tomam as formas funcionais

$$\mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\alpha}, \mathbf{M}, \dot{d}^h; \mathcal{E}) = \dot{W}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\alpha}, \mathbf{M}, \dot{d}^h; \mathcal{E}) + \phi^*(\dot{\alpha}, \dot{d}^h; \mathcal{E}), \quad (4.18)$$

$$\bar{\mathcal{P}}(\dot{\mathbf{F}}; \mathcal{E}) = \inf_{\dot{\alpha} \geq 0, \mathbf{M} \in \mathcal{K}_M, \dot{d}^h \geq 0} \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\alpha}, \mathbf{M}, \dot{d}^h; \mathcal{E}). \quad (4.19)$$

Uma vez que $\mathbf{M} \in \mathcal{K}_M$, a minimização definida em relação a essa variável é realizada por meio da avaliação das condições de estacionariedade da função Lagrangiana

$$\mathcal{L} = \mathcal{P} + \lambda_1(\mathbf{M} : \mathbf{I}) + \lambda_2(\mathbf{M} : \mathbf{M} - 3/2), \quad (4.20)$$

sendo λ_1 e λ_2 multiplicadores de Lagrange. Após algumas operações (Apêndice B), uma forma fechada para a direção do fluxo \mathbf{M} é obtida,

$$\mathbf{M} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\tilde{\Sigma}_d^e}{\|\tilde{\Sigma}_d^e\|}, \quad (4.21)$$

sendo $\tilde{\Sigma}_d^e$ a componente desviadora do tensor de Mandel elástico, isto é,

$$\tilde{\Sigma}_d^e = \text{dev} \left(2\mathbf{C}^e \frac{\partial W^e}{\partial \mathbf{C}^e} \right), \quad (4.22)$$

na qual $\text{dev}(\bullet) = [\mathbb{I}_S - 1/3(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})] : (\bullet)$.

Além disso, a condição de otimalidade para minimização em relação à $\dot{\alpha} \geq 0$ fornece duas possíveis soluções. Se

$$\left. \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\alpha}} \right|_{\dot{\alpha}=0^+} \geq 0, \quad (4.23)$$

o mínimo de \mathcal{P} é alcançado em $\dot{\alpha} = 0$, ou seja, não há um fluxo inelástico. Do contrário, existirá um valor $\dot{\alpha} > 0$ que satisfaz a condição de estacionariedade

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\alpha}} = (1 - d) \left[(\sigma_Y + \bar{\kappa}) - \tilde{\Sigma}_{eq} \right] + f_A(\alpha) \left(\frac{\dot{\alpha}}{c} \right)^\eta = 0, \quad (4.24)$$

na qual $\tilde{\Sigma}_{eq} = \tilde{\Sigma}_d^e : \mathbf{M}$ é uma tensão equivalente do tipo von Mises associada ao tensor elástico de Mandel efetivo. A equação resultante (4.24) corresponde a uma versão clássica de regra de escoamento viscoplástico. Observe que o último termo que quantifica a sobretensão devido ao fluxo viscoso (resistência ao fluxo) não é afetado diretamente pela variável de dano. A princípio esse aspecto possibilita uma simplificação matemática do modelo, sendo considerado uma escolha particular. Observações experimentais são necessárias a fim de se validar tal opção. Eventuais mudanças podem ser avaliadas pela modificação direta do potencial (4.14).

A correspondente condição de otimalidade para a minimização em re-

lação à variável $d^h \geq 0$ é dada por

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial d^h} = -Y + \frac{R}{(1-d)^n (Y+g)^{m-1}} d^h - g = 0, \quad (4.25)$$

condição que reescrita em forma conveniente fornece a lei de evolução para o dano hidrolítico, isto é,

$$\dot{d}^h = (1-d)^n \frac{(Y+g)^m}{R}. \quad (4.26)$$

Nota-se que uma versão linear clássica para a equação de evolução é obtida tomando-se $n = 1$, enquanto valores negativos de n podem ser relacionados a processos nos quais um aumento da danificação total aceleraria a degradação química do material. A constante g por sua vez garante que haja uma evolução da variável d^h mesmo na ausência de uma energia mecânica armazenada Y . A Equação (4.26) pode ser considerada de certa forma equivalente à lei de evolução para degradação proposta em [Rajagopal, Srinivasa e Wineman \(2007\)](#). A principal diferença entre os casos reside no fato da existência em [Rajagopal, Srinivasa e Wineman \(2007\)](#) de uma condição limiar de deformação para que haja degradação, ou seja, abaixo desse limiar não ocorrerá degradação. Se também considerarmos o caso em que $n = 1$ e o termo $Y + g > 0$ é constante, a solução fundamental da equação diferencial (4.26) será equivalente à função de dano encontrada nos trabalhos de [Vieira et al. \(2011a\)](#), [Vieira et al. \(2011b\)](#), [Vieira, Guedes e Tita \(2012, 2014\)](#), distinguindo-se uma da outra pela natureza de uma constante associada à função de degradação.

4.2 FORMULAÇÃO INCREMENTAL

Tendo como objetivo a atualização das variáveis de estado, torna-se necessária a obtenção de um potencial incremental consistente com (4.18). Para isso, considera-se as seguintes aproximações:

$$\dot{\alpha} = \frac{\Delta \alpha}{\Delta t}, \quad \dot{d}^h = \frac{\Delta d^h}{\Delta t}, \quad \Delta d^p = \Delta \alpha \frac{Y^S}{N}, \quad (4.27)$$

sendo $\Delta(\bullet) = (\bullet)_{n+1} - (\bullet)_n$. Desta forma é possível definir os potenciais

$$\mathcal{W} = [W(\mathcal{E}_{n+1}) - W(\mathcal{E}_n)] + \Delta t \phi^*(\mathbf{M}, \Delta \alpha, \Delta d^h), \quad (4.28)$$

$$\bar{\mathcal{W}}(\mathcal{E}_{n+1}; \mathcal{E}_n) = \inf_{\Delta\alpha \geq 0, \mathbf{M} \in \mathcal{K}_M, \Delta d^h \geq 0} \mathcal{W}(\mathcal{E}_{n+1}; \mathcal{E}_n), \quad (4.29)$$

nos quais \mathcal{W} é dado por (4.5) e ϕ^* passa a ser a versão incremental do potencial dissipativo proveniente de (4.13), que após mudanças convenientemente realizadas em seus argumentos resulta em:

$$\begin{aligned} \phi^* = & (1 - d_{n+1}) \sigma_Y \frac{\Delta\alpha}{\Delta t} + \frac{c f_A(\alpha_{n+1})}{\eta + 1} \left(\frac{\Delta\alpha/\Delta t}{c} \right)^{\eta+1} + Y_{n+1} \frac{\Delta d^p}{\Delta t} \\ & + \frac{R}{2(1 - d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 - g \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \quad (\theta, \gamma) \in [0, 1]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

As variáveis $d_{n+\theta}$ e $Y_{n+\gamma}$ representam valores dentro de um determinado incremento de tempo (Apêndice A). Regras parcialmente implícitas ou explícitas são determinadas dependendo das escolhas feitas para esses parâmetros. Independentemente dos valores adotados, o potencial (4.30) converge de forma consistente para (4.13) quando Δt tende a zero.

A minimização do problema (4.29) é resolvida a cada incremento de tempo para um dado \mathbf{F}_{n+1} , fornecendo o conjunto de minimizadores $\{\Delta\alpha, \mathbf{M}, \Delta d^h\}$ e consequentemente o estado atualizado \mathcal{E}_{n+1} .

Algumas escolhas operacionais permitem certas facilidades no tocante ao processo de minimização em relação à direção de fluxo \mathbf{M} . A primeira delas consiste na utilização do conhecido mapeamento exponencial (WEBER; ANAND, 1990) para obtenção da atualização do tensor \mathbf{F}_{n+1}^p uma vez definidos $\Delta\alpha$ e \mathbf{M} , isto é,

$$\mathbf{F}_{n+1}^p = \exp[\Delta t \mathbf{D}^p] \mathbf{F}_n^p = \exp[\Delta\alpha \mathbf{M}] \mathbf{F}_n^p \quad (4.31)$$

Outras expressões necessárias são aquelas que relacionam o tensor atualizado \mathbf{F}_{n+1}^p à deformação elástica $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e$ e à deformação logarítmica $\hat{\mathbf{e}}_{n+1}^e$:

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \mathbf{F}_{n+1}^{p-1}, \quad (4.32)$$

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^{eT} \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^e = \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr} [\exp(\Delta\alpha \mathbf{M})]^{-2}, \quad (4.33)$$

$$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr} = \mathbf{F}_n^{p-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e \mathbf{F}_n^{p-1}, \quad (4.34)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{n+1}^e = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^e = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{pr} - \Delta t \mathbf{D}^p, \quad (4.35)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}, \quad (4.36)$$

sendo $(\bullet)^{pr}$ empregado para designar elementos preditores. A Equação (4.33) é válida apenas se $\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}$ e \mathbf{D}^p forem considerados colineares, permitindo assim a permutação entre ambos os tensores (ORTIZ; STAINIER, 1999). Essa hipótese é confirmada posteriormente como uma consequência do procedimento de extremização. De forma análoga à condição definida em (4.19), a minimização em 4.29 avaliada em relação ao tensor \mathbf{M} é realizada por meio de uma função Lagrangiana. Como demonstrado no Apêndice B, se o potencial W^e for uma função quadrática do tensor de deformação logarítmico, isto é, um potencial elástico com o formato do potencial de Hencky,

$$W^e = \frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^e : \mathbb{D} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^e, \quad (4.37)$$

a condição de estacionariedade resulta na seguinte forma explícita para o tensor \mathbf{M} ,

$$\mathbf{M} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}}{\|\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}\|}. \quad (4.38)$$

Uma vez determinado \mathbf{M} , as condições de otimalidade relacionadas às variáveis escalares $\Delta\alpha$ e Δd^h são avaliadas em um procedimento de duas etapas. Primeiro, um estado preditor elástico é avaliado considerando $\Delta\alpha = 0$ e obtendo um valor $\Delta d^h > 0$ que satisfaça

$$\left. \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta d^h} \right|_{\Delta\alpha=0^+} = 0. \quad (4.39)$$

Conhecendo Δd^h , verifica-se a condição

$$\left. \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta\alpha} \right|_{\Delta\alpha=0^+} \geq 0, \quad (4.40)$$

que sendo verdadeira, condiz com o caso no qual o mínimo de \mathcal{W} é obtido em $\Delta\alpha = 0$ e, portanto, o estado é efetivamente elástico, resultando no par de variáveis $(\Delta\alpha = 0, \Delta d^h)$ que representam os valores atualizados para as mesmas. Por outro lado, se a derivada parcial em (4.40) for negativa, então $\Delta\alpha > 0$ e deve-se buscar a solução para $(\Delta\alpha, \Delta d^h)$ que satisfaça as condições de estacionariedade

$$r_1 = \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta\alpha} = \mathcal{G} \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \Delta\alpha} + \mathbf{A} + \Delta t \mathbf{B} = 0, \quad (4.41)$$

$$r_2 = \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta d^h} = -(Y_{n+1} + g) + \frac{R}{(1 - d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \\ + \Delta t \left[\theta \frac{nR}{2(1 - d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 - \sigma_Y \left(\frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \right) \right] = 0, \quad (4.42)$$

nas quais \mathcal{G} , A e B são expressões dadas por

$$\mathcal{G} = (1 - d_{n+1}) + \Delta t \frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \frac{Y_{n+1}^S}{N} - \Delta t \sigma_Y \left(\frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \right) S \Delta \alpha \frac{Y_{n+1}^{S-1}}{N} \\ + \Delta t \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \gamma \frac{1 - m}{(1 - d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^m} \\ + \Delta t \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{n}{(1 - d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N}, \quad (4.43)$$

$$A = \mathcal{G} \kappa + (1 - d_{n+1}) \sigma_Y + f_A(\alpha_{n+1}) \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^\eta, \quad (4.44)$$

$$B = \frac{c}{\eta + 1} \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^{\eta+1} \frac{\partial f_A(\alpha_{n+1})}{\partial \Delta \alpha} - \sigma_Y \frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \frac{Y_{n+1}^S}{N} \\ + \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta \frac{n}{(1 - d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^S}{N}. \quad (4.45)$$

O procedimento acima pode ser comparado àquele de um preditor-elástico/corretor-plástico que ocorre nos esquemas clássicos de mapeamento de retorno (SIMO; HUGHES, 1998).

Finalmente, como uma consequência da parametrização (4.27-c), a variável incremental Δd^p pode ser obtida diretamente empregando-se aquela equação, isto é,

$$\Delta d^p = \Delta \alpha \frac{Y_{n+1}^S}{N}.$$

Um vez conhecida a solução para as variáveis de estado incrementais, o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff pode ser calculado por meio

de

$$\mathbf{S}_{n+1} \equiv 2 \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \mathcal{G} \tilde{\mathbf{S}}_{n+1} , \quad (4.46)$$

sendo a tensão efetiva $\tilde{\mathbf{S}}_{n+1}$ descrita pela forma clássica do segundo tensor de Piola-Kirchhoff

$$\tilde{\mathbf{S}}_{n+1} = 2 \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = J_{n+1}^{-2/3} \mathbb{P} : \left(2 \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{\partial U_{n+1}}{\partial J_{n+1}} J_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1} , \quad (4.47)$$

sendo $\mathbb{P} = \mathbb{I}_s - 1/3 (\mathbf{C}_{n+1}^{-1} \otimes \mathbf{C}_{n+1})$ o operador projeção isocórico.

4.3 OPERADOR TANGENTE CONSISTENTE

Em um contexto numérico, a definição de um operador tangente consistente pode ser necessária, por exemplo, quando o método de Newton-Raphson é utilizado para encontrar a solução de equilíbrio global para o método de elemento finitos. A derivação de tal módulo tangente consistente resulta em termos associados à geometria e ao material, sendo os termos relacionados à contribuição geométrica idênticos àqueles resultantes para uma formulação hiperelástica, enquanto os termos associados ao material são dados por

$$\mathbb{C} = 4 \frac{d}{d\mathbf{C}_{n+1}} \left(\frac{d\mathcal{W}}{d\mathbf{C}_{n+1}} \right) = 2 \frac{d(\mathcal{G} \tilde{\mathbf{S}}_{n+1})}{d\mathbf{C}_{n+1}} , \quad (4.48)$$

ou, após aplicar a regra do produto,

$$\mathbb{C} = 2\mathcal{G} \frac{d\tilde{\mathbf{S}}_{n+1}}{d\mathbf{C}_{n+1}} + 2\tilde{\mathbf{S}}_{n+1} \otimes \frac{d\mathcal{G}}{d\mathbf{C}_{n+1}} . \quad (4.49)$$

4.4 ALGORITMO

A sequência operacional para se obter a solução do modelo constitutivo proposto pode ser resumida pelo algoritmo apresentado na Tabela 4.1. É importante destacar que o modelo foi implementado em dois códigos de elementos finitos, sendo o primeiro um código laboratorial para cinemática finita chamado CEOS, desenvolvido internamente pelo Grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE-UFSC), e o segundo, o código comercial ABAQUS,

por meio de rotina de usuário (UMAT). Sob condições idênticas de simulação (geometria, material, condições de contorno, passo de carregamento, tipo de formulação do elemento), ambos os códigos reproduzem resultados iguais.

Tabela 4.1: Estrutura algorítmica proposta.

Dados os valores iniciais	Equação
$\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n^p, \mathcal{E}_n, \Delta t$	
i - Calcule	
$J_{n+1} = \det(\mathbf{F}_{n+1})$	
$\hat{\mathbf{F}}_{n+1} = J_{n+1}^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F}_{n+1}$	
$\hat{\mathbf{C}}_{n+1} = \hat{\mathbf{F}}_{n+1}^T \hat{\mathbf{F}}_{n+1}$	
$\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr} = \hat{\mathbf{F}}_n^{p-T} \hat{\mathbf{C}}_{n+1} \mathbf{F}_n^p$	(4.34)
$\mathbf{M} = \sqrt{\frac{3}{2} \frac{\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}}{\ \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}\ }}$	(4.38)
$\boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^{pr} = \frac{1}{2} \ln \hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}$	(4.36)
$\mathbf{Y}_{n+1}^{pr} = \mathbf{W}_{n+1}^e(\boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^{pr}) + \mathbf{W}_{n+1}^p(\alpha_n) + U_{n+1}(J_{n+1})$	
ii - Para $\Delta\alpha = 0$ obtenha Δd^h resolvendo	
$r_2 = \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta d^h} = 0$	(4.42)
iii - Atualize	
$d_{n+1} = d_n + \Delta d^h$	
iv - Para $\Delta\alpha = 0$ e Δd^h	
(a) calcule	
$\mathcal{G}, \mathbf{A}, \mathbf{B}$	(4.43), (4.44), (4.45)
(b) verifique	
$r_1 = \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta\alpha} = \mathcal{G} \frac{\partial \hat{\mathbf{W}}_{n+1}^e}{\partial \Delta\alpha} + \mathbf{A} + \Delta t \mathbf{B} > 0$	(4.41)
v - Se $r_1 > 0$, resolva para $\Delta\alpha$ e Δd^h o sistema	
$r_1 = 0, r_2 = 0 \quad (\mathcal{G}, \mathbf{A} \text{ e } \mathbf{B})$	(4.41), (4.42)
e atualize as variáveis	
$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1}^e = \boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^{pr} - \Delta\alpha \mathbf{M}$	(4.35)
$\alpha_{n+1} = \alpha_n + \Delta\alpha$	
$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{W}_{n+1}^e(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1}^e) + \mathbf{W}_{n+1}^p(\alpha_{n+1}) + U_{n+1}(J_{n+1})$	
$\Delta d^p = \Delta\alpha \frac{\mathbf{Y}_{n+1}^p}{N}$	(4.27-c)
$d_{n+1}^p = d_n^p + \Delta d^p \quad d_{n+1}^h = d_n^h + \Delta d^h$	
$\mathbf{F}_{n+1} = \exp[\Delta\alpha \mathbf{M}] \mathbf{F}_n$	(4.31)
senão	
$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{n+1}^e = \boldsymbol{\epsilon}_{n+1}^{pr}$	
$\alpha_{n+1} = \alpha_n$	
$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{Y}_{n+1}^{pr}$	
$d_{n+1}^p = d_n^p \quad d_{n+1}^h = d_n^h + \Delta d^h$	
$\mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{F}_n^p$	
vi - Calcule a tensão	
$\tilde{\mathbf{S}}_{n+1} = J_{n+1}^{-2/3} \mathbb{P} : \left(2 \frac{\partial \mathbf{W}_{n+1}^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}_{n+1}} \right) + \frac{\partial U_{n+1}}{\partial J_{n+1}} J_{n+1} \mathbf{C}_{n+1}^{-1}$	(4.47)
$\mathbf{S}_{n+1} = \mathcal{G} \tilde{\mathbf{S}}_{n+1}$	(4.46)

5 EXEMPLOS E RESULTADOS

Neste capítulo, respostas características do modelo proposto são apresentadas e avaliadas por meio de exemplos numéricos. Três grupos distintos de testes foram executados. Primeiro, ensaios uniaxiais de tração sob condições homogêneas, incluindo testes de relaxação e de fluência, foram considerados a fim de se apresentar características intrínsecas do modelo, isto é, respostas típicas relacionadas ao comportamento dos materiais assim como a influência de parâmetros numéricos nos resultados obtidos. Em seguida, testes em um modelo de elementos finitos de uma barra cilíndrica com um entalhe central foram realizados, também considerando condições uniaxiais de tração. Ensaios realizados em barras com entalhes são procedimentos usualmente empregados em ensaios laboratoriais com objetivo de caracterizar e validar modelos materiais. Finalmente, um exemplo baseado em um típico componente fabricado em material bioabsorvível é apresentado através da simulação de uma âncora de sutura. Esse último exemplo ilustra o potencial de utilização da formulação proposta em casos reais de projeto e desenvolvimento de aplicações.

Antes de apresentarmos os exemplos, algumas informações complementares sobre o modelo são necessárias. A fim de se representar o comportamento viscoplástico do material certas escolhas podem ser feitas em relação às funções de encruamento (enrijecimento do polímero) e saturação. Neste estudo, adota-se uma forma clássica para a contribuição plástica do potencial de energia livre $W^P(\alpha)$, resultando em uma função de encruamento com formato da lei de Voce mais um termo linear, assim,

$$\kappa = \frac{\partial W^P}{\partial \alpha} = H(1 - e^{-n\alpha}) + k\alpha, \quad (5.1)$$

sendo

$$W^P = H\alpha + \frac{H(e^{-n\alpha} - 1)}{n} + \frac{1}{2}k\alpha^2 \quad (5.2)$$

e H , n , k constantes do material.

Seguindo a mesma opção adotada por [Brassart e Stainier \(2012\)](#), a saturação viscoplástica $f_A(\alpha)$ é tomada como uma função linear da deformação plástica acumulada

$$f_A(\alpha) = k_v + h\alpha, \quad (5.3)$$

sendo k_v e h constantes. Tais funções de encruamento (enrijecimento) e satu-

ração não são de nenhuma forma possibilidades únicas. Diferentes escolhas e formatos podem ser propostos e facilmente integrados à atual formulação.

Um conjunto de 16 parâmetros constitutivos deve ser definido para que se possa representar o comportamento de um material. Os testes numéricos apresentados nas Seções 5.1, 5.2 e 5.3 empregam os dados de uma material hipotético, que apesar de não terem sido obtidos por um processo de identificação de parâmetros, fornecem valores possíveis para a representação física de um material real. A Tabela 5.1 mostra o valores selecionados para as contantes do material.

Tabela 5.1: Propriedades constitutivas de um material hipotético.

Parâmetro constitutivo	Símbolo	Valor
Módulo de cisalhamento (MPa)	μ	492,960
Módulo volumétrico (MPa)	K	1998,027
Módulo de encruamento linear isotrópico (MPa)	k	17,5
Módulo de encruamento isotrópico (MPa)	H	5,2
Expoente de encruamento isotrópico	n	140
Tensão de escoamento (MPa)	σ_Y	120
Expoente viscoplástico (sensibilidade à taxa)	η	0,2
Constante viscoplástica (viscosidade, 1/s)	c	1,1
Módulo da função de saturação (MPa)	h	0
Constante da função de saturação (MPa)	k_v	100
Expoente de dano dúctil	S	2
Constante de dano dúctil (J/mm^3) ^S	N	550
Expoente de dano hidrolítico	m	1,5
Expoente de sensibilidade ao dano	n	1
Constante de dano hidrolítico (J/mm^3) ^m	R	125×10^6
Constante de dano hidrolítico (J/mm^3)	g	0,1

É importante destacar que todos os resultados de tensão que serão apresentados daqui em diante correspondem à tensão nominal de Cauchy (homogeneizada), em contraste com as definições de forças termodinâmicas efetivas definidas pelas equações em (4.17).

5.1 TESTES DE RELAXAÇÃO E DE FLUÊNCIA UNIAXIAL

Inicialmente são simulados testes uniaxiais de carregamento-descarregamento sob condições homogêneas de tensão produzidas por meio de um histórico de deformação controlada. Três taxas de deformação são utilizadas: $0,001 \text{ s}^{-1}$, $0,05 \text{ s}^{-1}$, 2 s^{-1} . Para todos os casos, uma deformação logarítmica máxima de 0,5 foi alcançada.

Na Figura 5.1, os efeitos viscoplásticos e do dano dúctil são evidenciados nas curvas tensão de Cauchy vs. deformação logarítmica. Devido ao curto período de tempo do teste, a degradação hidrolítica é praticamente nula. O dano plástico é observado notadamente pelo decaimento da tensão de Cauchy durante o estágio de carregamento bem como na redução de inclinação da curva elástica no procedimento de descarregamento. A influência da taxa de deformação na evolução do dano dúctil é mostrada na Figura 5.2. Quanto maior a taxa de deformação, maior o estado final de degradação do material.

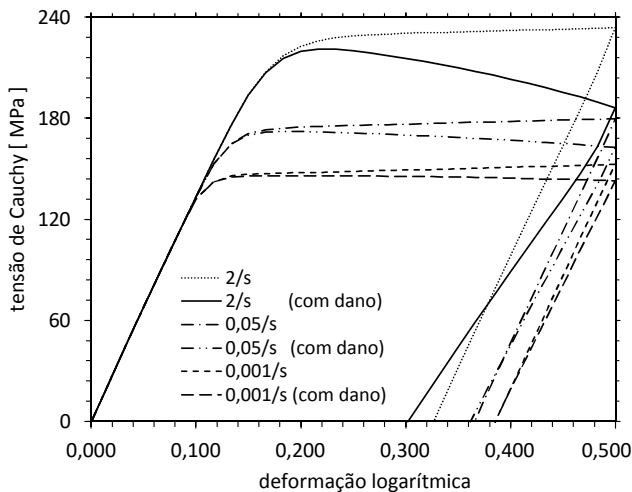


Figura 5.1: Influência da taxa de deformação e do dano dúctil nas curvas de tensão-deformação.

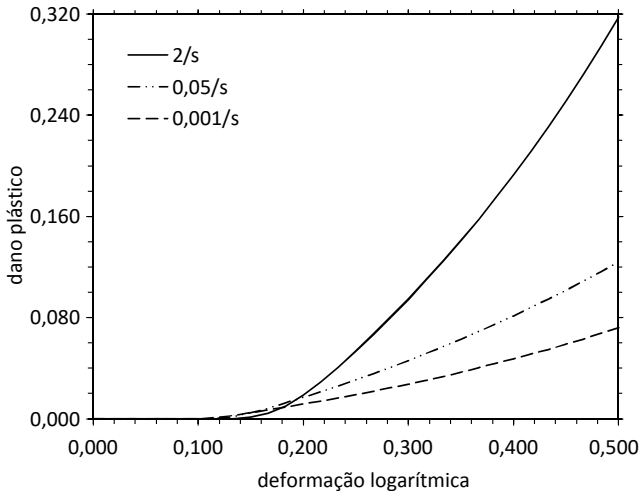


Figura 5.2: Dano plástico vs. deformação logarítmica total para três taxas de deformação.

Se considerarmos o estado final do procedimento de carregamento anterior (antes do descarregamento) e mantivermos a deformação total constante, um processo de relaxação viscosa e degradação pode ser observado. Dois estágios ficam então evidentes. Na Figura 5.3, é apresentada a relaxação viscoplástica que ocorre nos primeiros 40 s para três condições iniciais de tensão e dano plástico. Deve-se observar que, novamente, devido ao curto período de tempo avaliado a degradação hidrolítica é praticamente inexistente. Ressalta-se ainda que para materiais não danificados todas as curvas de relaxação decairiam assintoticamente para o mesmo nível de tensão. Contudo, como o material observado acumula certo grau de danificação, a relaxação viscoplástica resulta em diferentes valores finais de tensão para cada um dos casos analisados.

Considerando o período de tempo subsequente, isto é, de 10^2 s a 10^7 s (~ 115 dias), a Figura 5.4 indica como a degradação hidrolítica influencia a resposta do material, influência essa notada pelo decaimento acentuado da curva de tensão para valores de tempo superiores a 10^5 s.

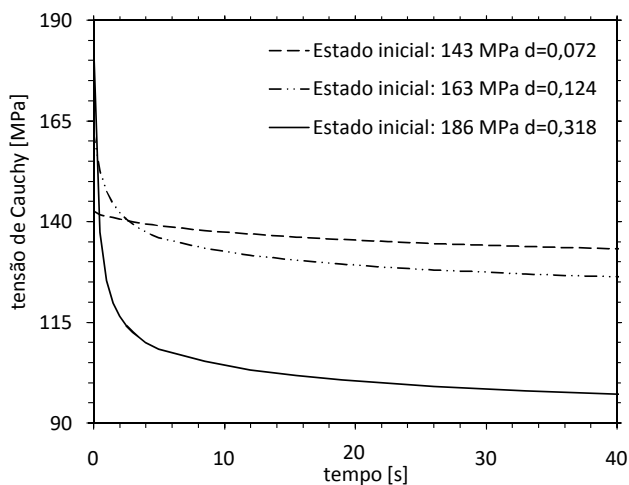


Figura 5.3: Curvas de relaxação para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico. Respostas relativas aos primeiros 40 s do ensaio.

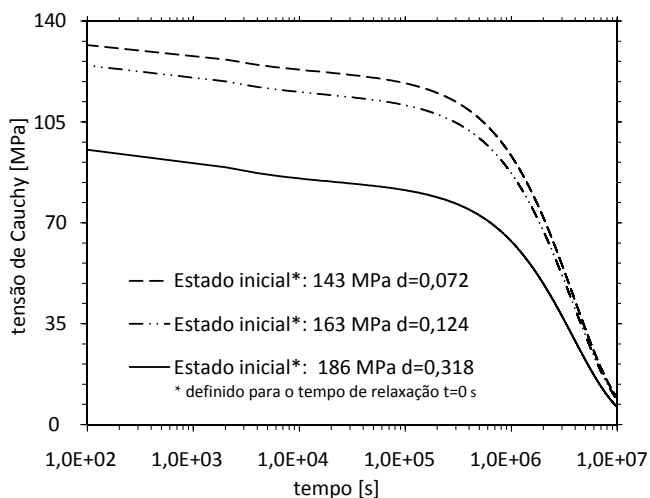


Figura 5.4: Influência da degradação hidrolítica nas curvas de relaxação para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.

Ainda para os primeiros 40s do processo de relaxação, observa-se um pequeno aumento do dano plástico para as condições iniciais resultantes do ensaio de tração (Figura 5.5). Após esse estágio, a variação do dano plástico passa a ser desprezível.

Curvas de evolução do dano hidrolítico e do dano total são apresentadas nas Figuras 5.6 e 5.7. À medida que o processo de degradação progride, a taxa de danificação é reduzida por consequência da lei de evolução adotada (4.26).

Um teste de fluência também é realizado seguindo procedimento similar àquele empregado para relaxação. Uma carga de 112 N é progressivamente aplicada durante um período de 28 s em uma área inicialmente de 1 mm² resultando em uma tensão de Cauchy final de 120,018 MPa.

A influência da degradação hidrolítica na resposta do material fica claramente evidenciada nas Figuras 5.8 e 5.9, nas quais são mostradas a evolução da deformação logarítmica e da tensão de Cauchy. Duas situações distintas podem então ser comparadas, isto é, quando ocorre e quando não ocorre a degradação por hidrólise, sendo essas condições respectivamente indicadas por linhas contínuas e tracejadas.

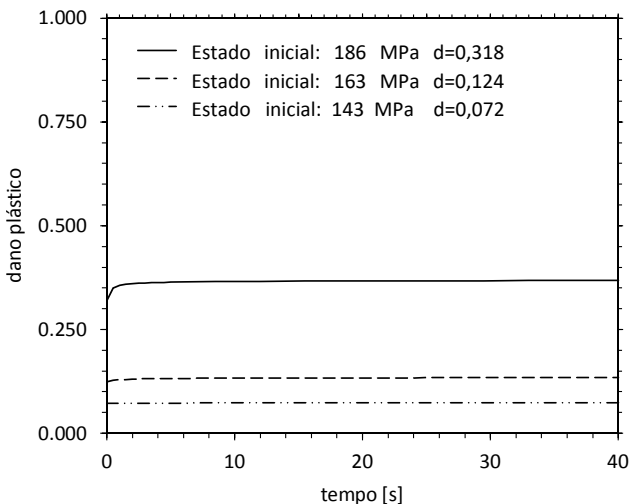


Figura 5.5: Evolução do dano plástico para os primeiros 40 s considerando diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.

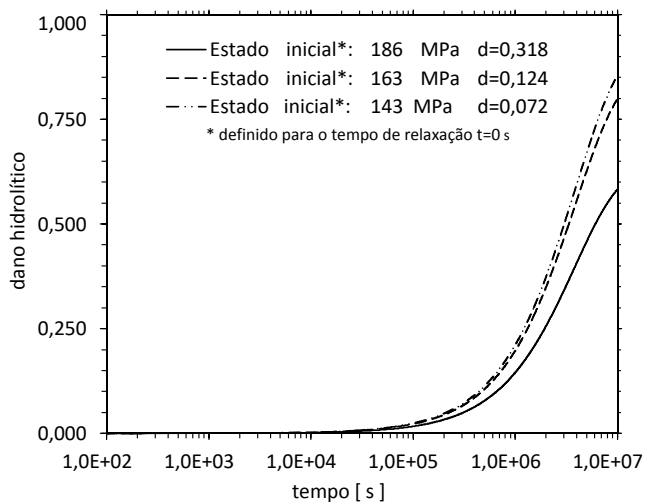


Figura 5.6: Evolução do dano hidrolítico para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.

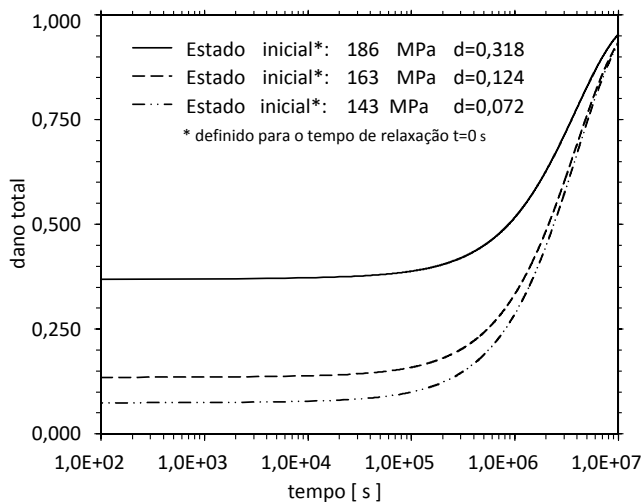


Figura 5.7: Evolução do dano total para diferentes estados iniciais de tensão e dano plástico.

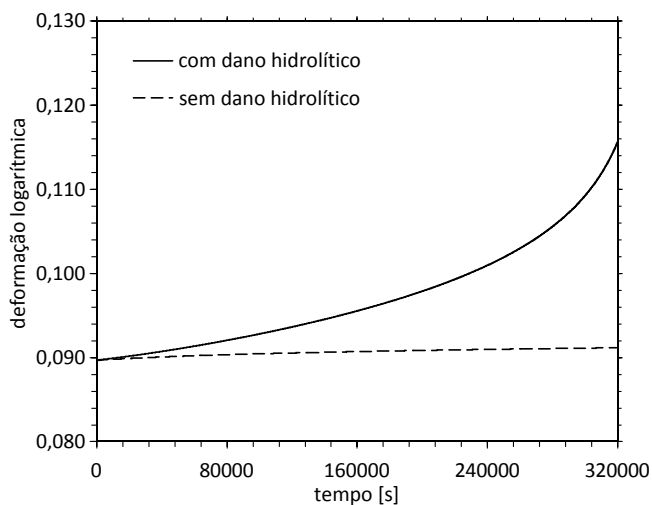


Figura 5.8: Influência dos efeitos de dano na evolução da deformação logarítmica para uma carga constante de 112 N.

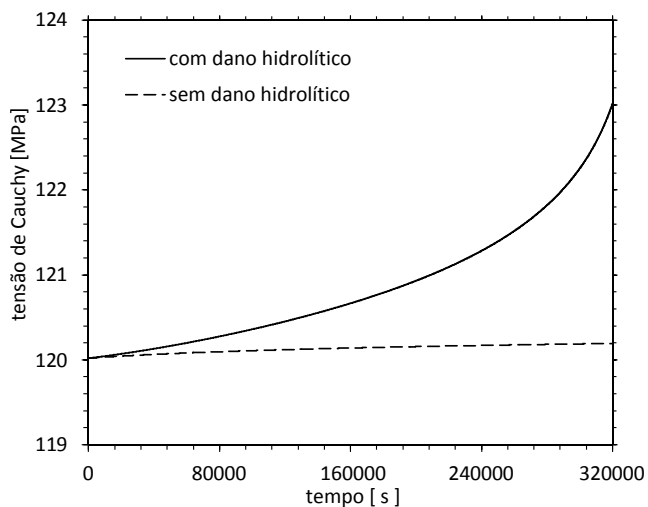


Figura 5.9: Influência dos efeitos de dano na evolução da tensão para uma carga constante de 112 N.

Os exemplos acima apresentados (Figuras 5.1-5.9) demonstram algumas das principais características relacionadas à capacidade do modelo de representar fenômenos tipicamente viscosos e adicionalmente acoplados à danificação dúctil-hidrolítica. A seguir, alguns aspectos numéricos do modelo são discutidos.

5.2 ANÁLISE DO ESQUEMA DA DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

Nesta seção, será avaliada a influência dos parâmetros de discretização temporal θ e γ . Esses parâmetros definem os valores intermediários $d_{n+\theta}$ e $Y_{n+\gamma}$. Sendo assim, para o caso em que $\theta = 1$ e $\gamma = 1$ fica estabelecido um esquema de solução correspondente a uma integração implícita total. Por outro lado, caso se empregue combinação diferente de valores, define-se parcialmente uma regra de ponto médio. Desta forma, testes foram executados tal como descritos a seguir.

Inicialmente, os mesmos testes de relaxação avaliados na seção anterior foram executados, sendo que incrementos de tempo de $\Delta t = 2000$ s foram empregados a fim de se estabelecer uma solução de referência. Fato possível, pois o referido incremento de tempo equivale a um pequeno valor quando comparado à escala de tempo do experimento ($t = 10 \times 10^6$ s).

Assim, ao definirmos os parâmetros θ e γ conforme a Tabela 5.2 e prosseguindo com a avaliação, desta vez, para incrementos de tempo $\Delta t = 333333,3$ s, obtém-se como resposta as curvas de tensão e dano hidrolítico apresentadas respectivamente nas Figuras 5.10 e 5.11. Tais resultados correspondem aos estudos com carregamento a taxas de deformação de $0,05 \text{ s}^{-1}$, sendo que os maiores erros medidos em relação à curva de referência foram encontrados para os casos 3 e 4. Embora não apresentadas aqui, respostas similares são obtidas também para as demais taxas de deformação (0.001 s^{-1} e 2 s^{-1}).

Tabela 5.2: Parâmetros de integração.

Caso	θ	γ
1	1	1
2	0	0
3	1	0
4	0	1

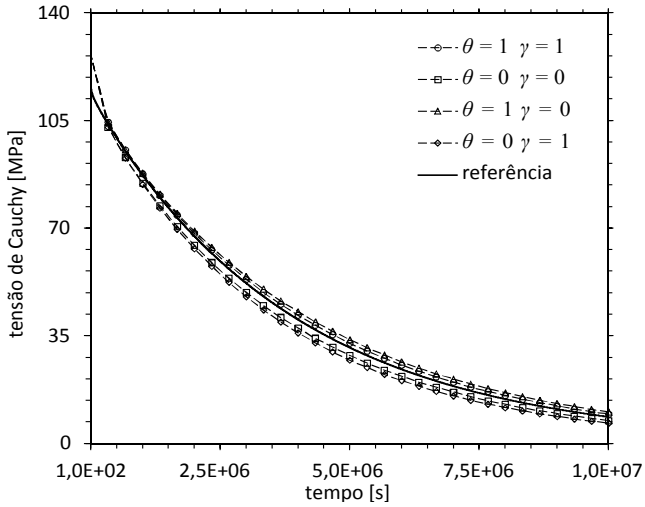


Figura 5.10: Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ nas curvas de tensão para o teste de relaxação.

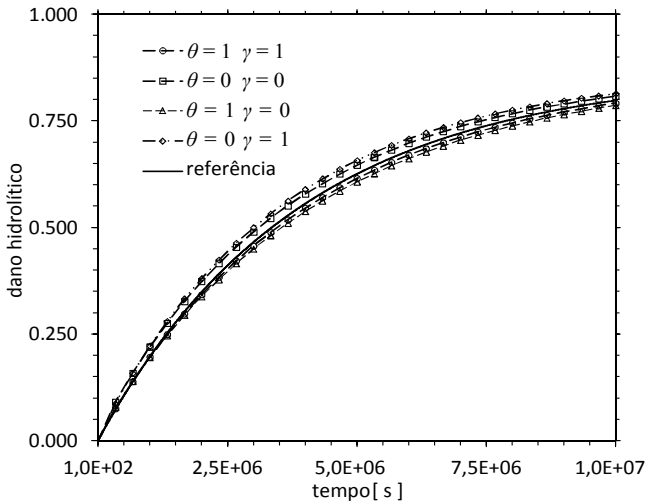


Figura 5.11: Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ na solução do dano hidrolítico para o teste de relaxação.

Outro experimento numérico realizado em relação aos parâmetros θ e γ consistiu em um teste de tração para taxas de deformação consideravelmente baixas, isto é, $\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$. Nesses testes, uma deformação logarítmica total de 0,5 é alcançada para um tempo de ensaio correspondente a $t = 10 \times 10^6 \text{ s}$ (~ 115 dias). Os parâmetros θ e γ foram definidos novamente conforme os valores da Tabela 5.2 e os incrementos de tempo fixados respectivamente como $\Delta t = 2000 \text{ s}$ para a curva de referência e $\Delta t = 333333,3 \text{ s}$ para os demais casos. Como mostrado nas Figuras 5.12 e 5.13, os resultados tendem a divergir da solução de referência, sendo que a melhor aproximação pode ser considerada aquela para $\theta = 1$ e $\gamma = 0$ (caso 3).

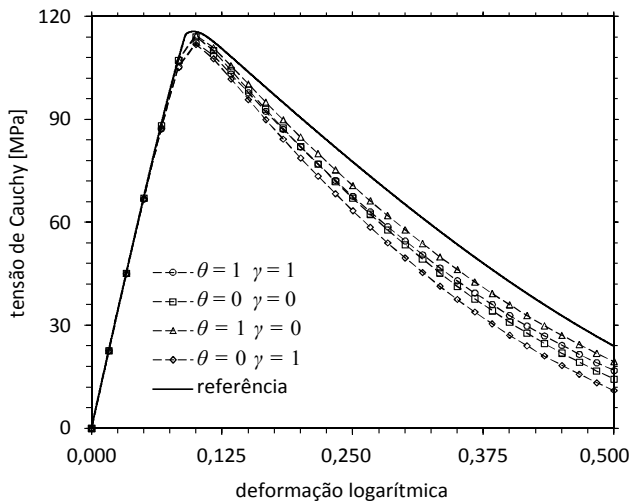


Figura 5.12: Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ nas curvas de tensão para os testes com taxas de deformação consideravelmente baixas ($\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$).

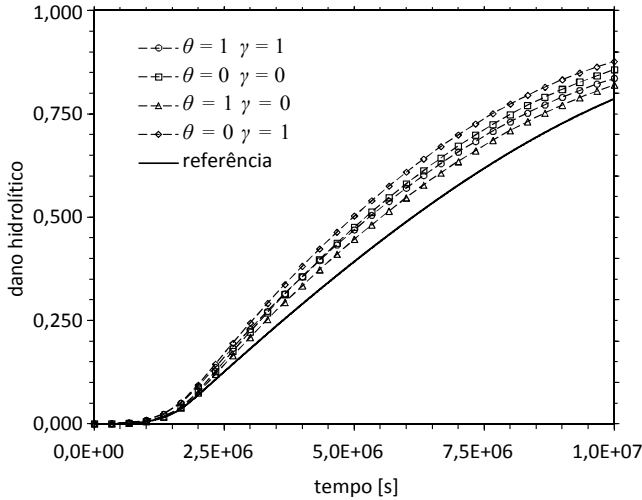


Figura 5.13: Avaliação da influência dos parâmetros θ e γ na solução do dano hidrolítico em testes de tração a taxas de deformação consideravelmente baixas ($\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$).

A Figura 5.14 por sua vez mostra uma avaliação de convergência para a tensão em relação ao incremento de tempo Δt . Um erro relativo é então estimado entre os valores calculados de tensão (σ) e aqueles tomados como referência (σ_{ref}),

$$\text{erro} = \frac{|\sigma - \sigma_{\text{ref}}|}{\sigma_{\text{ref}}}.$$

O cálculo do erro foi feito para os valores de tensão correspondentes aos instantes de tempo $t = 5 \times 10^6 \text{ s}$ nos casos dos testes de relaxação e $t = 6,7 \times 10^6 \text{ s}$ naqueles em que baixas taxas de deformação foram empregadas. Os referidos instantes são aqueles em que se notam os maiores erros. Os estudos foram realizados considerando, por conveniência, os parâmetros $\theta = 1$ e $\gamma = 1$ (solução totalmente implícita). Para os dois casos avaliados (estudos 1 e 2) é possível concluir que incrementos menores que $\Delta t = 40000 \text{ s}$ (0,4% do tempo total) resultam em erros inferiores a 1,1% e com passos de até $\Delta t = 150000 \text{ s}$ (1,5% do tempo total) os erros máximos permanecem abaixo de 5,0%.

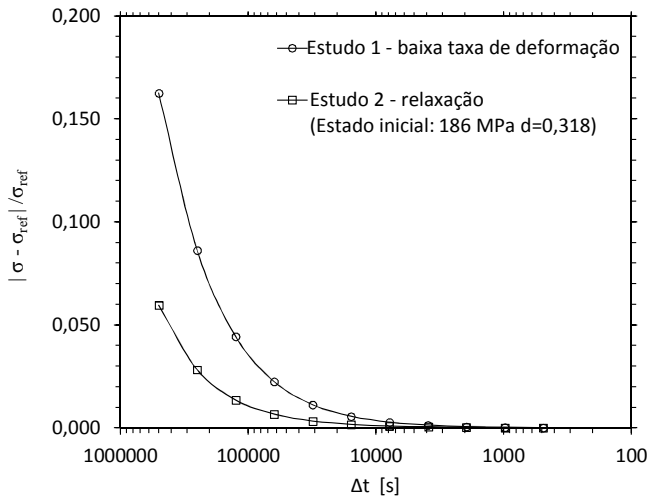


Figura 5.14: Avaliação da convergência para tensão em relação ao incremento de tempo Δt . Estudo 1, para taxas de deformação baixas ($\dot{\epsilon} = 5 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$) com erro avaliado em $t = 6,7 \times 10^6 \text{ s}$. Estudo 2, para os testes de relaxação a partir do estado inicial de tensão 186 MPa e $d = 0,318$, com erro avaliado em $t = 5 \times 10^6 \text{ s}$. Tempo total do ensaio $t = 10 \times 10^6 \text{ s}$ e parâmetros $\theta = 1$ e $\gamma = 1$ para ambos os casos.

Por meio da presente avaliação, e conforme esperado, confirma-se que localmente as soluções dos campos de tensão e dano podem efetivamente ser influenciadas pela escolha dos parâmetros θ , γ e Δt . Deve-se observar que tal influência surge como consequência da dependência do potencial de dissipação incremental em relação à energia elástica armazenada (contida na variável Y). Também é possível avaliar os efeitos decorrentes da escolha de θ , γ e Δt em casos que envolvam modelos mais complexos (modelos 2-D e 3-D em elementos finitos). Sugere-se, a princípio, empregar valores de Δt razoavelmente pequenos (inferiores a 1,5%) em relação ao tempo total de simulação nos casos que envolvam condições similares aos acima relatados. Em todos os estudos que seguem, optou-se por empregar valores de $\theta = 1$ e $\gamma = 1$ (totalmente implícito), mantendo-se Δt sempre inferior a 0,3125% em relação ao tempo total de relaxação ou fluência. Alguns testes preliminares indicaram que para os casos subsequentes (Seções 5.3 e 5.4), diferentes combinações dos parâmetros θ e γ resultam em variações desprezíveis dos

campos de tensão e dano, e também nos valores referentes às respostas globais de grandezas como força e deslocamento. Contudo, testes adicionais poderão ser realizados para se obter informações mais conclusivas.

Nas próximas seções, simulações de casos tridimensionais serão apresentadas.

5.3 TESTES EM BARRA CIRCULAR COM ENTALHE

Neste exemplo, avalia-se um problema no qual ocorrem condições não homogêneas de deformação. Um modelo de uma barra cilíndrica com um entalhe central é utilizado para simular um teste de tração bem como condições de relaxação e fluência. A geometria e dimensões do modelo são mostradas na Figura 5.15. Devido a sua configuração simétrica, um oitavo da geometria é empregado na simulação, sendo que elementos hexaedros de 20 nós com integração reduzida foram utilizados. Condições de contorno de simetria são aplicadas ao modelo de elementos finitos, sendo as demais condições, deslocamento ou força impostas, prescritas sobre a superfície da extremidade da barra. Conforme observado na Seção 5.2, adotou-se um processo de integração totalmente implícito ($\theta = 1$ e $\gamma = 1$) e um incremento de tempo máximo de $\Delta t = 2500$ s ($< 0,21\%$) para a solução dos processos de relaxação e fluência.

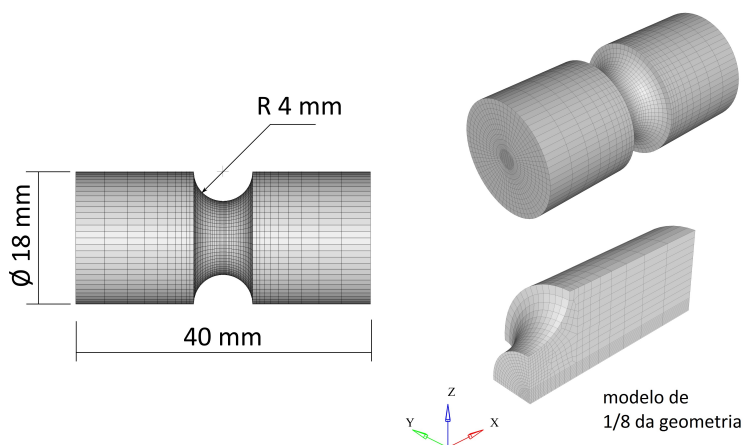


Figura 5.15: Modelo de uma barra circular com entalhe central.

5.3.1 Testes de relaxação

Para execução do teste de relaxação, inicialmente um deslocamento prescrito de $u_x = 1,2$ mm é aplicado linearmente em relação ao tempo para um intervalo de 0 a 10 s, de modo a tracionar o corpo de prova até um comprimento final correspondente a 42,4 mm. Um vez tracionado, o deslocamento prescrito é mantido constante por um tempo de $1,2 \times 10^6$ s (~ 14 dias).

A Figura 5.16 mostra então os campos de tensão, dano dúctil e degradação hidrolítica (de cima para baixo), bem como se dá a evolução desses campos ao longo do teste (da esquerda para direita) ¹. Nota-se que durante o decorrer do ensaio a degradação hidrolítica passa a ser predominante, enquanto o dano dúctil fica restrito a uma pequena região. A máxima danificação se inicia na superfície da raiz do entalhe e progride em direção ao centro da barra, fato esse similar àquele usualmente observado em metais para a evolução de um dano dúctil (de SOUZA NETO; PERIC; OWEN, 2008; LI et al., 2011). A Figura 5.17 torna essa observação clara, mostrando a evolução do dano total. Adicionalmente, apresenta-se os gráficos de distribuição do dano hidrolítico e dúctil (Figura 5.18) assim como de dano total (Figura 5.19) ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe (plano Y-Z, para fins de comparação o raio considerado é o da geometria indeformada). E para concluir, a curva de relaxação da força de reação é mostrada nas Figuras 5.20 e 5.21, correspondendo respectivamente aos períodos inicial (até 40 s) e final do processo de relaxação. A Figura 5.21 também indica as diferenças entre as repostas de um material sob efeito de degradação (linha contínua) e outro, por sua vez, que não está sob tal condição (linha tracejada).

¹Obs.: Em todas as legendas de cores a separação decimal aparece representada por meio de ponto ao invés de vírgula.

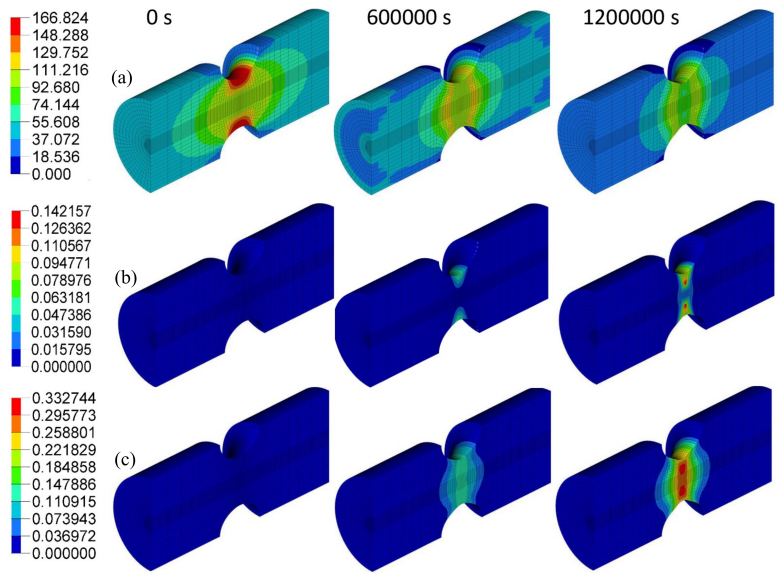


Figura 5.16: Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Evolução (a) da tensão de von Mises [MPa] e dos danos (b) plástico e (c) hidrolítico .

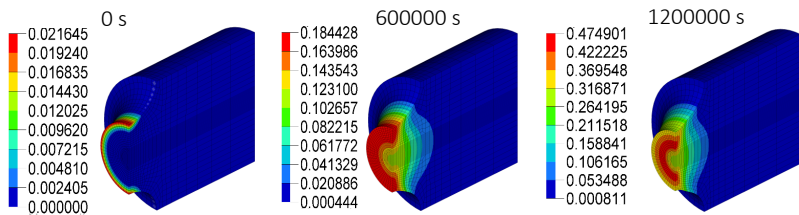


Figura 5.17: Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Evolução do campo de dano total.

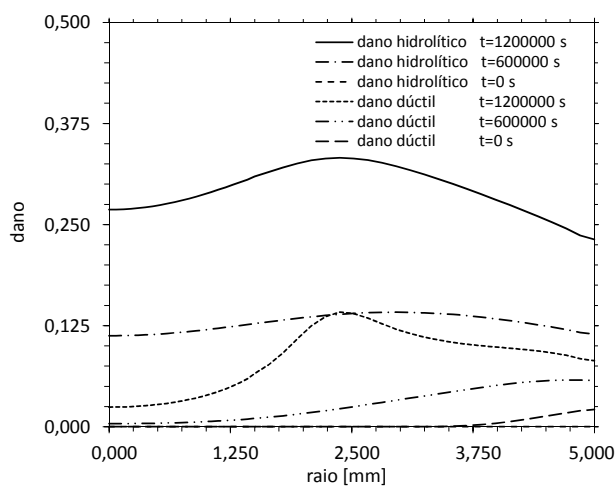


Figura 5.18: Distribuição de dano hidrolítico e dúctil ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.

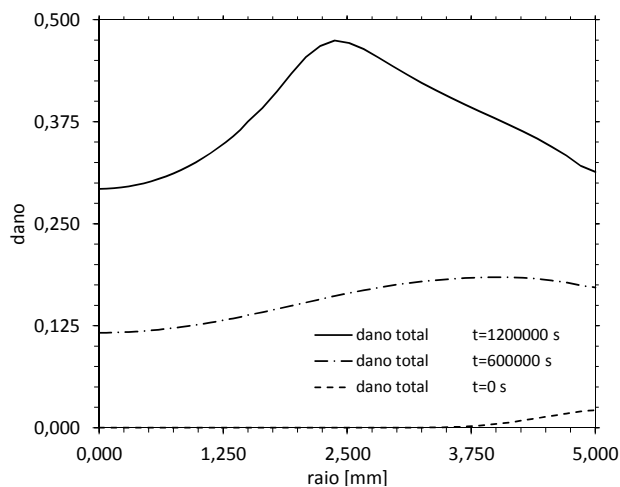


Figura 5.19: Distribuição de dano total ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.

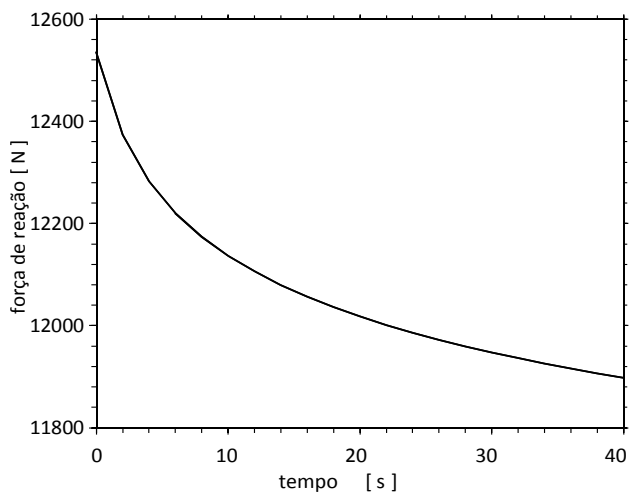


Figura 5.20: Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Estágio inicial de relaxação.

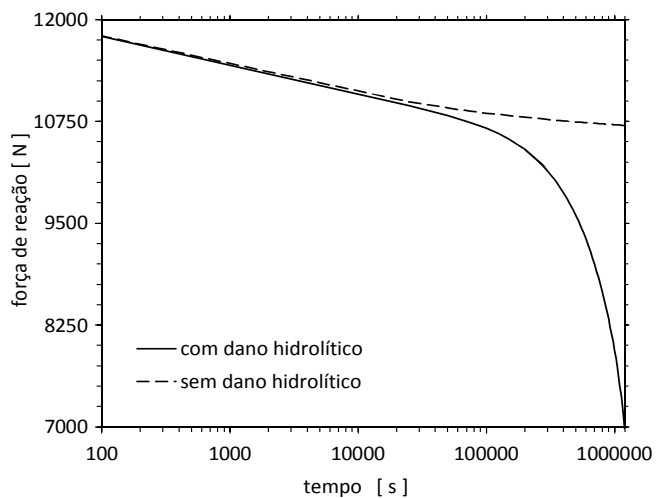


Figura 5.21: Teste de relaxação em uma barra circular com entalhe central. Estágio final de relaxação. Diferenças de respostas entre um material sob efeito de degradação e outro que não está.

5.3.2 Teste de fluência

Para o teste de fluência, considera-se que uma carga de 8589,5 N, a qual cresce linearmente até esse valor em um intervalo de tempo de 0 a 10 s, é mantida constante até o instante final do ensaio, isto é, em $t = 2,7 \times 10^6$ s (~ 31 dias).

Sob tais condições, a parcela de contribuição viscoplástica na resposta mecânica do corpo de prova foi relativamente pequena, enquanto a contribuição devido ao dano hidrolítico tornou-se predominante. A Figura 5.22 mostra respectivamente os campos de tensão, dano dúctil e degradação hidrolítica (de cima para baixo) e como esses campos evoluem ao longo do experimento (da esquerda para direita). Adicionalmente, é possível avaliar a evolução do dano total na Figura 5.23. Também são apresentados os gráficos de distribuição do dano hidrolítico e dúctil (Figura 5.24) bem como de dano total (Figura 5.25) ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe (plano Y-Z, para fins de comparação o raio considerado é o da geometria indeformada). Na Figura 5.26 mostra-se a resposta inicial (primeiros 40 s) do tipo fluência para um material sob degradação hidrolítica. Além disso, ilustra-se através da Figura 5.27 uma situação que poderia ser interpretada como um caso típico de falha prematura, no qual um componente sob ação da degradação hidrolítica não é capaz de suportar a carga após um certo tempo crítico.

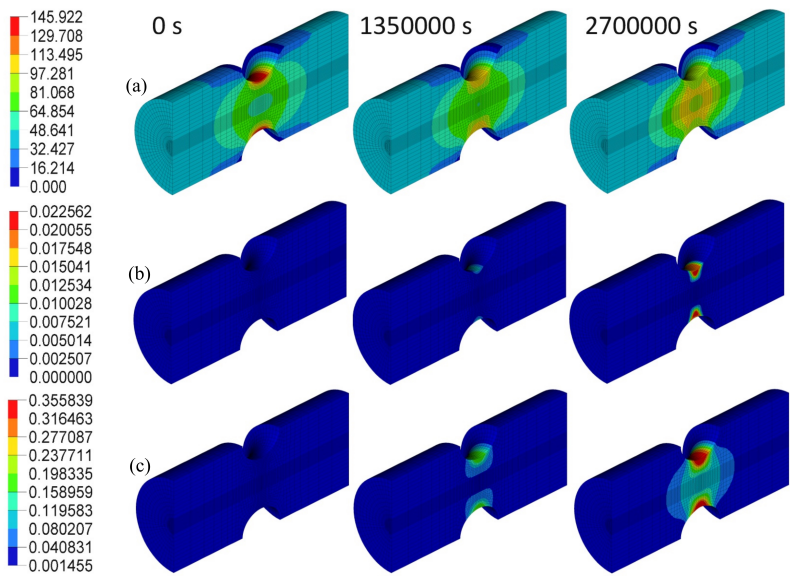


Figura 5.22: Teste de fluência em uma barra circular com entalhe central. Evolução (a) da tensão de von Mises [MPa] e dos danos (b) plástico e (c) hidrolítico.

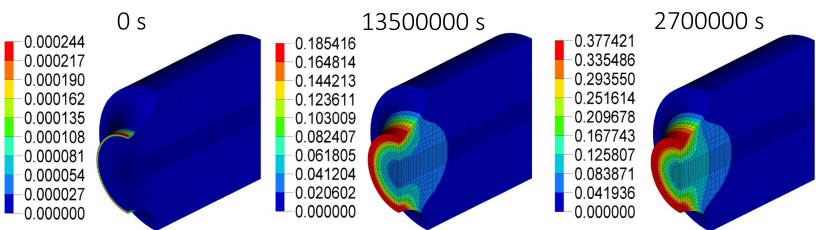


Figura 5.23: Teste de fluência em uma barra circular com entalhe central. Evolução do dano total.

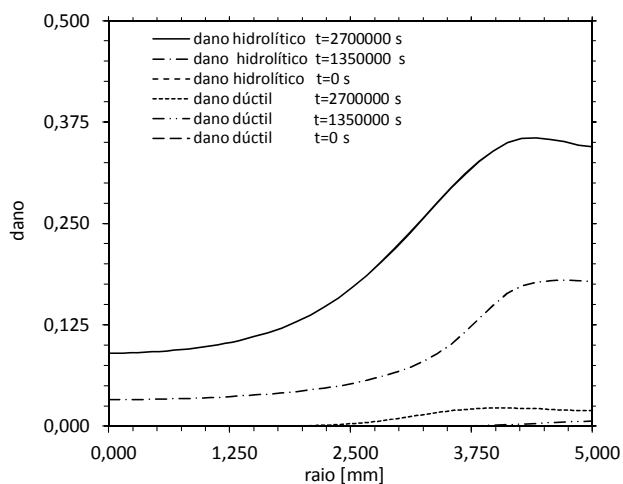


Figura 5.24: Distribuição de dano hidrolítico e dúctil ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.

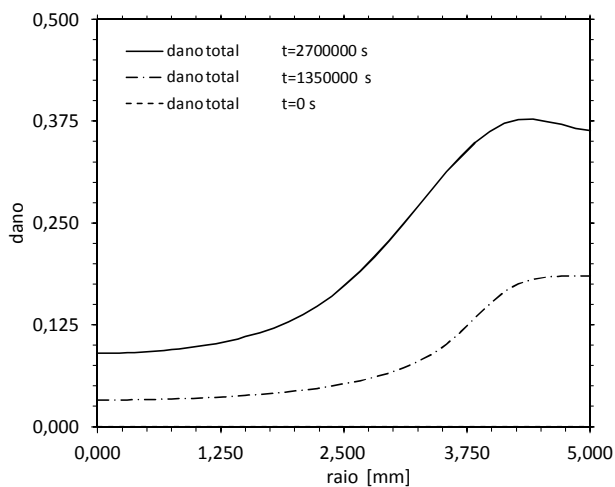


Figura 5.25: Distribuição do dano total ao longo do raio da barra na seção transversal junto ao entalhe.

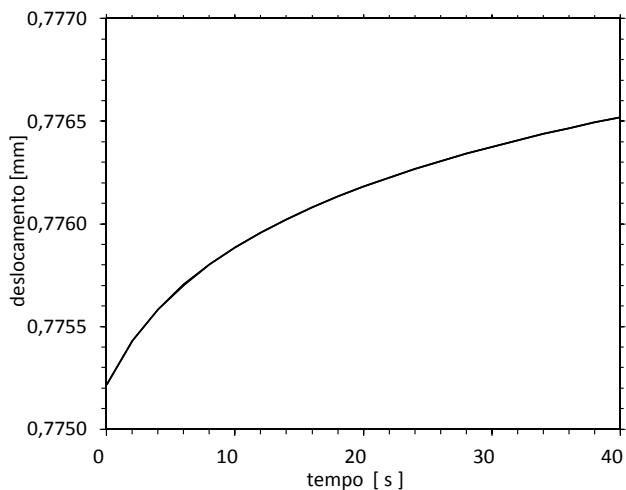


Figura 5.26: Resposta do tipo fluência para um material sob degradação hidrolítica. Avaliação do estágio inicial do ensaio (40 s).

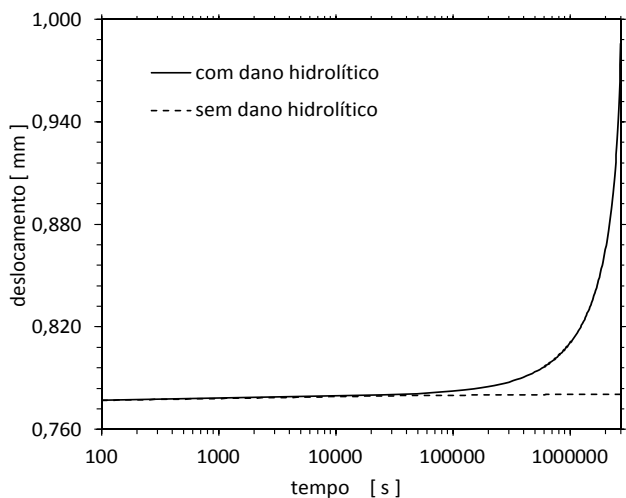


Figura 5.27: Resposta do tipo fluência para um material sob degradação hidrolítica. Avaliação do estágio final do ensaio. Resultado comparativo entre um material que está sob efeito de degradação hidrolítica e outro que não está.

5.4 TESTES EM UMA ÂNCORA DE SUTURA

O desenvolvimento de implantes bioabsorvíveis tem sido notadamente uma tendência na última década, promovendo avanços consideráveis em procedimentos médicos. A formulação constitutiva estabelecida neste trabalho pode ser uma ferramenta importante no projeto de tais componentes. Por isso, uma demonstração de uma análise de uma âncora de sutura será realizada com intuito de ilustrar a aplicação do modelo.²

5.4.1 Identificação de novos parâmetros constitutivos

Tendo em vista uma melhor representação do comportamento de um material polimérico bioabsorvível, novos valores para os parâmetros constitutivos foram buscados. Esses novos valores foram identificados com base em dados experimentais selecionados e reportados por [Soares \(2008\)](#). Naquele trabalho uma série de experimentos de degradação em fibras do material PLLA foram executados. Aqui, consideramos os dados dos testes de tração e relaxação em fibras não degradadas bem como os dos testes de tração realizados em fibras degradadas durante um período de 9 meses. As fibras foram ensaiadas para duas condições de degradação. Na primeira, o material foi colocado em um banho em solução tampão à temperatura de 37°C, sem a ação de nenhuma carga externa, enquanto na segunda, a fibra permanece adicionalmente sob a ação de uma força (peso morto) de 0,98 N durante os 9 meses.

O mesmo procedimento descrito por [Soares \(2008\)](#) foi simulado, sendo adotado um diâmetro médio das fibras de 0,938 mm. Considerando um comportamento elástico compressível, e considerando um valor médio aproximado para o coeficiente de Poisson de $\nu = 0,410$, o parâmetro μ foi ajustado para aproximar o comportamento inicial da curva de tração para o material não degradado, enquanto o módulo de compressibilidade K é obtido por condição de isotropia. Os parâmetros do modelo de encruamento (k , H , n , σ_Y , associado ao enrijecimento do polímero) e viscoplásticos (η , c , h , k_v) foram estimados por meio de ajuste de curva para tração e relaxação, novamente relacionados ao material não degradado. Uma vez que os experi-

²Não se tem aqui a intenção de se desenvolver um projeto de tal componente, caso haja o interesse específico nesse assunto, sugere-se por exemplo a consulta a trabalhos como os de [Bynum \(2005\)](#) e [Hughes et al. \(2014\)](#).

mentos não fornecem dados sobre o dano plástico-dúctil, parâmetros (S , N) que introduzem apenas uma pequena contribuição para esse fenômeno foram convenientemente escolhidos, tornando possível que todos os efeitos de acoplamento fossem avaliados. Mantendo todos os parâmetros mencionados acima fixos, avaliações iterativas foram realizadas para a estimativa dos parâmetros de dano hidrolítico (m , n , R , g), tanto para o material sem degradação quanto para os degradados. A sequência acima foi repetida até que um conjunto satisfatório de valores foi alcançado. O processo de identificação de parâmetros resultou nos ajustes de curvas apresentados nas Figuras 5.28 e 5.29, estando os correspondentes parâmetros constitutivos registrados na Tabela 5.3. Tais valores devem ser considerados como um exemplo ilustrativo dos parâmetros necessários para execução de uma simulação representativa.

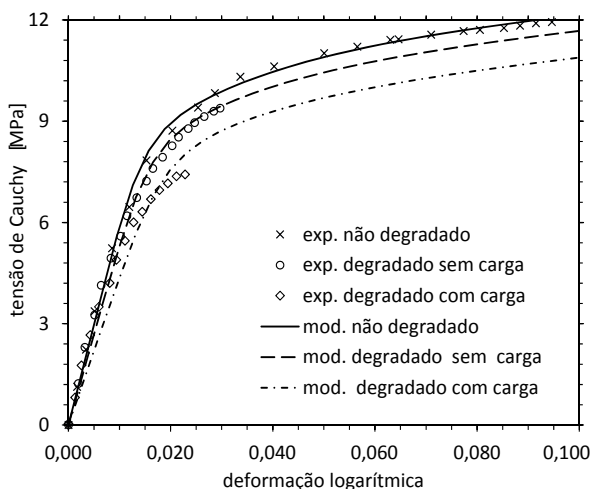


Figura 5.28: Ajuste de curvas dos dados experimentais publicados em Soares (2008) para o material PLLA. Teste de tração para os materiais não degradados e degradados. Teste realizado para uma taxa de deformação de engenharia de 5%/min.

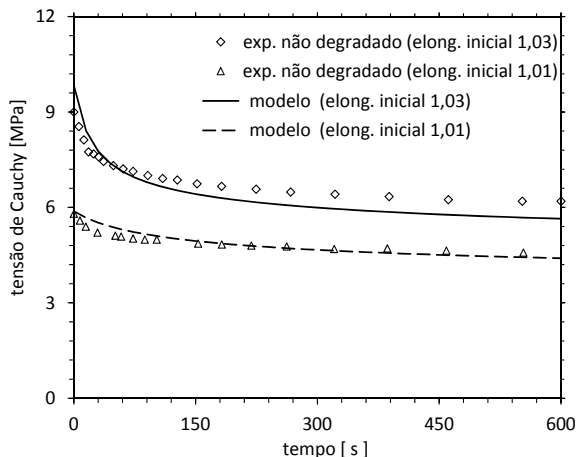


Figura 5.29: Ajuste de curvas dos dados experimentais publicados em Soares (2008) para o material PLLA. Teste de relaxação para os materiais não degradados e degradados.

Tabela 5.3: Parâmetros constitutivos identificados a partir dos dados de Soares (2008).

Parâmetro constitutivo	Símbolo	Valor
Módulo de cisalhamento (MPa)	μ	211,2676
Módulo volumétrico (MPa)	K	1109,155
Módulo de encruamento linear isotrópico (MPa)	k	2
Módulo de encruamento isotrópico (MPa)	H	2
Expoente de encruamento isotrópico	n	50
Tensão de escoamento (MPa)	σ_Y	2,3
Expoente viscoplástico (sensibilidade à taxa)	η	0,188
Constante viscoplástica (viscosidade, 1/s)	c	0,008
Módulo da função de saturação (MPa)	h	27
Constante da função de saturação (MPa)	k_v	10
Expoente de dano dúctil	S	2
Constante de dano dúctil(J/mm ³) ^S	N	8
Expoente de dano hidrolítico	m	0,3742
Expoente de sensibilidade ao dano	n	1
Constante de dano hidrolítico (J/mm ³) ^m	R	$7999,636 \times 10^3$
Constante de dano hidrolítico (J/mm ³)	g	$1,46 \times 10^{-4}$

De posse desses novos parâmetros, procede-se com a simulação de uma âncora de sutura, conforme descrito a seguir.

5.4.2 Simulação da âncora de sutura

Como indicado na Figura 5.30, a âncora é considerada parcialmente inserida em uma fundação rígida e uma força é aplicada em sua parte superior perpendicularmente ao seu eixo axial. O modelo é formado por uma malha de elementos tetraédricos de 10 nós, sendo que uma interface de contato é definida em uma área de transição entre a superfície totalmente engastada do modelo e a região livre do mesmo. O modelo é então submetido a uma carga total de 10 N que é aplicada a uma taxa de 1 Ns^{-1} , permanecendo sua intensidade final constante até o final do ensaio ($8 \times 10^6 \text{ s}$, ~ 92 dias). Conforme indicação apresentada na Seção 5.2, empregou-se um processo de integração totalmente implícito ($\theta = 1$ e $\gamma = 1$) e um incremento de tempo máximo de $\Delta t = 25000 \text{ s}$ ($< 0,3125\%$ do tempo total) para a solução do processo de fluência.

No tempo $t = 8 \times 10^6 \text{ s}$, o deslocamento do ponto de referência, que inicialmente é $u_{\text{ref}} = 0,234 \text{ mm}$, atinge $u_{\text{ref}} = 1,488 \text{ mm}$, fato esse atribuído principalmente à evolução do dano hidrolítico. As Figuras 5.31 e 5.32 mostram a localização de tensões e de dano plástico na região próxima à superfície livre de engaste que aceleram a degradação hidrolítica na mesma região, como esperado. Devido às características do modelo que não diferencia a evolução do dano dúctil entre estados de tensão trativos e compressivos, deve-se observar com atenção o fato de certos valores elevados do dano dúctil estarem presentes em uma região predominantemente de tensões compressivas, como indicado pelo campo de tensões hidrostáticas mostrado na Figura 5.33. A evolução do dano dúctil nessa região poderia ser considerada deficiente. Adicionalmente, para fins de comparação, a curva de deslocamento estimada para um componente sujeito ao processo de degradação é mostrada na Figura 5.34 juntamente com a curva correspondente ao caso em que o material não está sob a ação de tal efeito.

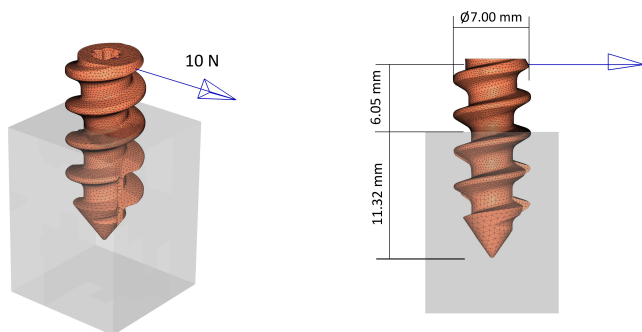


Figura 5.30: Geometria e modelo de elementos finitos de uma âncora de sutura.

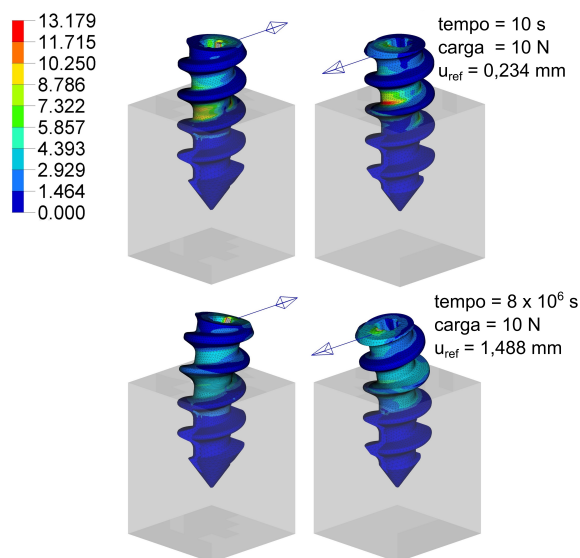


Figura 5.31: Tensão de von Mises [MPa] em uma âncora de sutura para um teste do tipo fluência.

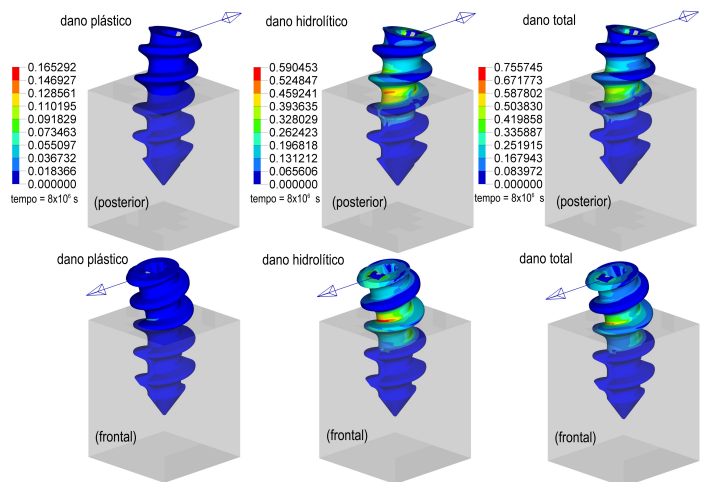


Figura 5.32: Estado final de danificação (8×10^6 s, ~ 92 dias) para um teste do tipo fluência em uma âncora de sutura.

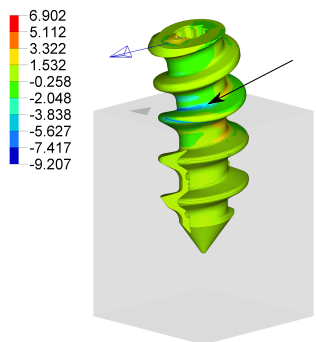


Figura 5.33: Tensão hidrostática [MPa] em uma âncora de sutura para um teste do tipo fluência.

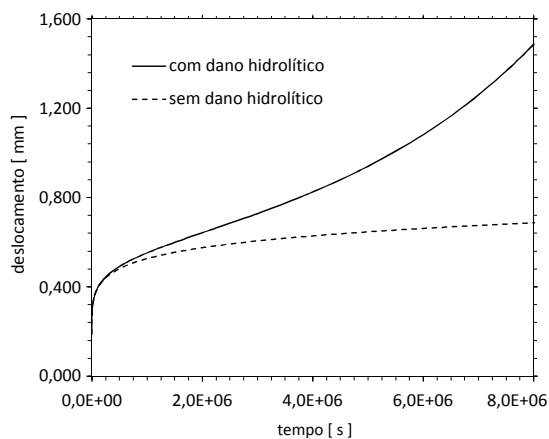


Figura 5.34: Deslocamento vs. tempo medidos para a âncora em relação ao ponto de referência para os casos de um componente que sofre degradação e outro que não está sob o efeito de degradação.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho, um modelo constitutivo para materiais elasto-viscoplásticos sujeitos à degradação hidrolítica e à danificação plástica foi apresentado. A formulação proposta é baseada na estrutura de atualizações constitutivas variacionais estabelecida por [Ortiz e Stainier \(1999\)](#), resultando em um modelo termodinamicamente consistente. O modelo desenvolvido mostrou-se capaz de representar de modo satisfatório efeitos induzidos pelo acoplamento entre fenômenos de fluxo viscoplástico, dano mecânico plástico e de dano químico hidrolítico. Mesmo tendo sido elaborada com o objetivo de representar fenômenos de natureza complexa, a formulação estabelecida fornece um algoritmo de atualização relativamente simples. Por outro lado, como aspecto comum a todo modelo que envolve conjuntamente vários fenômenos, é necessária a determinação de um número apreciável de parâmetros de material para o seu uso. Destaca-se que, embora seja possível encontrar na literatura importantes resultados experimentais no que diz respeito à degradação e sua relação com as propriedades termomecânicas dos materiais, ainda há uma certa falta de correlação entre esses resultados e sua aplicabilidade a análises por elementos finitos. Por isso, ressalta-se a necessidade de se empreender novos esforços na elaboração de ensaios laboratoriais e modelos numéricos computacionais que se complementem.

Algumas das questões relacionadas à dependência das funções de dissipação em relação a certas variáveis de estado, principalmente àquelas funções dependentes do estado elástico, foram investigadas e analisadas por meio de experimentos numéricos. Tais experimentos foram executados observando-se a influência da escolha dos parâmetros θ e γ na definição de $d_{n+\theta}^h$ e $Y_{n+\gamma}$, indicando os possíveis efeitos que a respectiva dependência a essas variáveis pode causar na solução final, tanto para o dano quanto para a tensão. Foi notado que na presente proposta os acoplamentos trazidos pelo dano hidrolítico, cuja evolução local depende fortemente do estado de tensão local, torna a escolha do passo temporal mais sensível que no caso de incorporação apenas do dano dúctil.

Deve-se ter claro que a atual proposta é baseada em uma formulação local de dano, portanto, a mesma está sujeita a conhecidas dificuldades causadas por tal tipo de abordagem (ex. dependência à malha). Acredita-se que alternativas para esse problema possam ser encontradas em métodos como *Thick Level Set* (TLS) ([MOës et al., 2010](#); [BERNARD](#); [MOës](#); [CHEVAUGEON, 2012](#); [STOLZ](#); [MOës, 2012](#); [SELKE, 2016](#)) ou em formulações não locais ([PEERLINGS et al., 2001](#); [LEMAITRE J. ; DESMORAT, 2005](#)).

Pretende-se futuramente investigar essas opções.

Também neste trabalho, reais potencialidades de emprego da formulação proposta foram demonstradas através de modelos tridimensionais em elementos finitos. Por meio de exemplos, verificou-se que é possível fornecer informações relevantes para decisões de engenharia no que se refere ao projeto de produtos e aplicações. Sendo assim, tem-se aqui estabelecida uma estrutura adequada para novos modelos constitutivos e futuras pesquisas.

6.1 TRABALHOS FUTUROS

Tendo em vista questões tecnológicas associadas ao desenvolvimento de novos materiais e aos seus correspondentes modelos matemático-numéricos de representação, algumas sugestões e oportunidades de trabalhos futuros são listadas a seguir.

- Estudar, propor e implementar possíveis aprimoramentos relacionados aos procedimentos numéricos para solução do sistema de equações do modelo atual, visando a melhoria de desempenho computacional e maior robustez do modelo. Obs.: Para determinados valores atribuídos aos parâmetros do modelo viscoplástico (Perzyna), constatou-se dificuldades em se obter a solução do sistema local de equações quando empregado o método de Newton-Raphson.
- Projeto de ensaios de caracterização de materiais destinados à simulação por elementos finitos. Elaboração e execução de procedimentos de identificação de parâmetros, com eventual auxílio de técnicas ópticas de medição.
- Adaptar a parcela viscoplástica do presente modelo ao comportamento típico de alguns polímeros, tal como aquele em que se observa o amolecimento pós-escoamento, seguido de um evolução da deformação com um patamar de tensão e posterior aumento da resistência ao fluxo viscoplástico. Trabalhos como os de [Anand et al. \(2009\)](#) e [Ames et al. \(2009\)](#) podem ser tomados como referência inicial nesse aspecto.
- Investigar os possíveis problemas decorrentes da formulação de dano não local e buscar alternativas para tratá-los.
- Proposta de uma abordagem que incorpore a diferenciação para evolução de dano entre estados de tensões trativas e compressivas.

- Como a formulação atual desconsidera os efeitos de concentração e difusão, um estudo voltado a esses fenômenos pode agregar novas capacidades ao modelo e abrir novos caminhos de pesquisa do ponto de vista da estrutura variacional apresentada.

REFERÊNCIAS

- AMES, N. M.; SRIVASTAVA, V.; CHESTER, S. A.; ANAND, L. A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part II: Applications. *International Journal of Plasticity*, Elsevier, v. 25, n. 8, p. 1495–1539, 2009.
- ANAND, L.; AMES, N. M.; SRIVASTAVA, V.; CHESTER, S. A. A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation. *International Journal of Plasticity*, Elsevier, v. 25, n. 8, p. 1474–1494, 2009.
- ARGON, A. S. *The Physics of Deformation and Fracture of Polymers*. Cambridge University Press, 2013.
- BAEK, S.; PENCE, T. J. On swelling induced degradation of fiber reinforced polymers. *International Journal of Engineering Science*, Elsevier, v. 47, n. 11, p. 1100–1109, 2009.
- BAEK, S.; PENCE, T. J. On mechanically induced degradation of fiber-reinforced hyperelastic materials. *Mathematics and Mechanics of Solids*, v. 16, n. 4, p. 406–434, 2011.
- BALZANI, D.; ORTIZ, M. Relaxed incremental variational formulation for damage at large strains with application to fiber-reinforced materials and materials with truss-like microstructures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 92, n. 6, p. 551–570, 2012.
- BARBANTI, S. H.; ZAVAGLIA, C. A. C.; DUEK, E. A. R. Polímeros bio-reabsorvíveis na engenharia de tecidos. *Polímeros*, FapUNIFESP (SciELO), v. 15, n. 1, p. 13–21, 2005.
- BARTELS, A.; BARTEL, T.; CANADIJA, M.; MOSLER, J. On the thermomechanical coupling in dissipative materials: A variational approach for generalized standard materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 82, p. 218–234, 2015.

BASTOS, I.; VASCONCELLOS, J.; GOMES, J.; COSTA-MATTOS, H. S. A continuum damage model for the stress corrosion cracking of austenitic stainless steel. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, SciELO Brasil, v. 27, n. 2, p. 186–191, 2005.

BERDICHEVSKY, V. *Variational Principles of Continuum Mechanics I. Fundamentals*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.

BERDICHEVSKY, V. *Variational Principles of Continuum Mechanics II. Applications*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.

BERGSTROM, J.; BOYCE, M. Constitutive modeling of the large strain time-dependent behavior of elastomers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 46, n. 5, p. 931–954, 1998.

BERGSTROM, J.; HAYMAN, D. An overview of mechanical properties and material modeling of polylactide (PLA) for medical applications. *Annals of Biomedical Engineering*, Springer, p. 1–11, 2015.

BERNARD, P.; MOËS, N.; CHEVAUGEON, N. Damage growth modeling using the Thick Level Set (TLS) approach: Efficient discretization for quasi-static loadings. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 233–236, p. 11–27, 2012.

BLEIER, N.; MOSLER, J. Efficient variational constitutive updates by means of a novel parameterization of the flow rule. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 89, n. 9, p. 1120–1143, 2012.

BLEIER, N.; MOSLER, J. A hybrid variationally consistent homogenization approach based on Ritz's method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 94, n. 7, p. 625–647, 2013.

BOBEL, A.; PETISCO, S.; SARASUA, J.; WANG, W.; MCHUGH, P. Computational bench testing to evaluate the short-term mechanical performance of a polymeric stent. *Cardiovascular Engineering and Technology*, Springer, v. 6, n. 4, p. 519–532, 2015.

BOLAND, E.; SHINE, R.; KELLY, N.; SWEENEY, C.; MCHUGH, P. A review of material degradation modelling for the analysis and design of bioabsorbable stents. *Annals of Biomedical Engineering*, Springer, p. 1–16, 2015.

BRASSART, L.; STAINIER, L. On convergence properties of variational constitutive updates for elasto-visco-plasticity. *GAMM-Mitteilungen*, WILEY-VCH Verlag, v. 35, n. 1, p. 26–42, 2012.

BRASSART, L.; STAINIER, L.; DOGHRI, I.; DELANNAY, L. A variational formulation for the incremental homogenization of elasto-plastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 59, n. 12, p. 2455–2475, 2011.

BRASSART, L.; STAINIER, L.; DOGHRI, I.; DELANNAY, L. Homogenization of elasto-(visco)-plastic composites based on an incremental variational principle. *International Journal of Plasticity*, v. 36, p. 86–112, 2012.

BROWN, N.; LU, X. PENT-universal test for slow crack growth in plastics. In: *Limitations of Test Methods for Plastics*. ASTM International, 2000. p. 146–154.

BYNUM, C. K. Failure mode of suture anchors as a function of insertion depth. *American Journal of Sports Medicine*, SAGE Publications, v. 33, n. 7, p. 1030–1034, 2005.

CALLISTER, W. D. *Material science and engineering: An introduction*. 7th. ed. John Wiley & Sons, Ltd., 2007.

CAMBRICOLI, F. *Stent absorvível pelo corpo passa a ser usado em cirurgia cardíaca*. Estadão Jornal Digital, dezembro 2016. <http://saude.estadao.com.br/noticias/geral, stent-absorvivel-pelo-corpo-passa-a-ser-usado-em-cirurgia-cardiaca, 1604110>. Último acesso: 30/01/2017.

CANADIJA, M.; MOSLER, J. A variational formulation for thermomechanically coupled low cycle fatigue at finite strains. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier, v. 100-101, p. 388–398, 2016.

CASTRO, P. B. *Identification of constitutive parameters by using full-field measurements: an example of application to an elastoplastic damage model*. Dissertação (Master Dissertation) — Department of Mechanical Engineering, Federal University of Santa Catarina, Brazil, 2012.

CHABOCHE, J. A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories. *International Journal of Plasticity*, v. 24, n. 10, p. 1642 – 1693, 2008. Special Issue in Honor of Jean-Louis Chaboche.

CHOW, C.; LU, T. An analytical and experimental study of mixed-mode ductile fracture under nonproportional loading. *International Journal of Damage Mechanics*, SAGE Publications, v. 1, n. 2, p. 191–236, 1992.

CORDEBOIS, J. P.; SIDOROFF, F. Damage induced elastic anisotropy. In: *Mechanical Behavior of Anisotropic Solids / Comportment Mécanique des Solides Anisotropes*. Springer Nature, 1982. p. 761–774.

COSTA-MATTOS, H. S.; BASTOS, I. N.; GOMES, J. A. C. P. A simple model for slow strain rate and constant load corrosion tests of austenitic stainless steel in acid aqueous solution containing sodium chloride. *Corrosion Science*, Elsevier, v. 50, n. 10, p. 2858–2866, 2008.

COSTA-MATTOS, H. S.; BASTOS, I. N.; GOMES, J. A. C. P. A thermodynamically consistent modelling of stress corrosion tests in elasto-viscoplastic materials. *Corrosion Science*, Elsevier, v. 80, p. 143–153, 2014.

de SOUZA NETO, E. A.; PERIC, D.; OWEN, D. R. *Computational methods for plasticity: Theory and applications*. John Wiley & Sons, Ltd., 2008.

DOITPOMS. *Spherulites and optical properties*. University of Cambridge. <<https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/polymers/spherulites.php>>. Último acesso: 05/02/2017.

DUAN, Y.; SAIGAL, A.; GREIF, R.; ZIMMERMAN, M. A. A uniform phenomenological constitutive model for glassy and semicrystalline polymers. *Polymer Engineering & Science*, Wiley, v. 41, n. 8, p. 1322–1328, 2001.

DUEK, E.; ZAVAGLIA, C.; BELANGERO, W. In vitro study of poly(lactic acid) pin degradation. *Polymer*, Elsevier, v. 40, n. 23, p. 6465–6473, 1999.

FANCELLO, E.; PONTOT, J.-P.; STAINIER, L. A variational formulation of constitutive models and updates in non-linear finite viscoelasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 65, n. 11, p. 1831–1864, 2006.

FANCELLO, E.; VASSOLER, J.; STAINIER, L. A variational constitutive update algorithm for a set of isotropic hyperelastic-viscoplastic material models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 197, n. 49-50, p. 4132–4148, 2008.

FANCELLO, E. A.; LINDENMEYER, L. P.; ROESLER, C. R.; SALMÓRIA, G. V. A simple extension of Lemaitre's elastoplastic damage model to account

for hydrolytic degradation. *Latin American Journal of Solids And Structures*, v. 11, n. 5, p. 884–906, 2014.

GASTALDI, D.; SASSI, V.; PETRINI, L.; VEDANI, M.; TRASATTI, S.; MIGLIAVACCA, F. Continuum damage model for bioresorbable magnesium alloy devices - Application to coronary stents. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, Elsevier, v. 4, n. 3, p. 352–365, 2011.

GLEADALL, A. Mechanical properties of biodegradable polymers for medical applications. In: *Modelling Degradation of Bioresorbable Polymeric Medical Devices*. Elsevier, 2015. p. 163–199.

GÖPFERICH, A. Mechanisms of polymer degradation and erosion. *Biomaterials*, v. 17, n. 2, p. 103–114, 1996.

GÖPFERICH, A.; TESSMAR, J. Polyanhydride degradation and erosion. *Advanced Drug Delivery Reviews*, Elsevier, v. 54, n. 7, p. 911–931, 2002.

GROGAN, J. A.; O'BRIEN, B. J.; LEEN, S. B.; MCHUGH, P. E. A corrosion model for bioabsorbable metallic stents. *Acta Biomaterialia*, Acta Materialia Inc., v. 7, n. 9, p. 3523–3533, 2011.

GSELL, C.; HIVER, J. M.; DAHOUN, A.; SOUAHI, A. Video-controlled tensile testing of polymers and metals beyond the necking point. *Journal of Materials Science*, Springer, v. 27, n. 18, p. 5031–5039, 1992.

GURSON, A. L. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I - Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *Journal of Engineering Materials and Technology*, ASME, v. 99, n. 1, p. 2–15, 1977.

GURTIN, M.; FRIED, E.; ANAND, L. *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*. Cambridge University Press, 2010.

HAYMAN, D.; BERGERSON, C.; MILLER, S.; MORENO, M.; MOORE, J. E. The effect of static and dynamic loading on degradation of PLLA stent fibers. *Journal of biomechanical engineering*, v. 136, n. 8, p. 081006.1–081006.9, 2014.

HUGHES, C. M.; BORDUSH, A.; ROBIONECK, B.; PROCTER, P.; BROWN, C. J. Bone anchors - A preliminary finite element study of some factors affecting pullout. *J. Med. Devices*, ASME International, v. 8, n. 4, p. 041006.1–041006.9, 2014.

IKADA, Y.; TSUJI, H. Biodegradable polyesters for medical and ecological applications. *Macromolecular Rapid Communications*, Wiley-Blackwell, v. 21, n. 3, p. 117–132, 2000.

KHAN, K.; EL-SAYED, T. A phenomenological constitutive model for the nonlinear viscoelastic responses of biodegradable polymers. *Acta Mechanica*, Springer Vienna, v. 224, n. 2, p. 287–305, 2013.

KINTZEL, O.; KHAN, S.; MOSLER, J. A novel isotropic quasi-brittle damage model applied to {LCF} analyses of Al2024. *International Journal of Fatigue*, v. 32, n. 12, p. 1948–1959, 2010.

KINTZEL, O.; MOSLER, J. A coupled isotropic elasto-plastic damage model based on incremental minimization principles. *Technische Mechanik*, v. 30, n. 1-3, p. 177–184, 2010.

KINTZEL, O.; MOSLER, J. An incremental minimization principle suitable for the analysis of low cycle fatigue in metals: A coupled ductile-brittle damage model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 200, n. 45-46, p. 3127–3138, 2011.

LANCZOS, C. *The Variational Principles of Mechanics*. Dover Publications, 1970.

LEMAITRE, J. A continuous damage mechanics model for ductile fracture. *Journal of Engineering Materials and Technology*, ASME International, v. 107, n. 1, p. 83, 1985.

LEMAITRE, J. Coupled elasto-plasticity and damage constitutive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 51, n. 1-3, p. 31–49, sep 1985.

LEMAITRE, J. *A course on damage mechanics*. 2nd. ed. Springer-Verlag, 1996.

LEMAITRE J. ; DESMORAT, R. *Engineering damage mechanics: ductile, creep, fatigue and brittle failures*. Springer-Verlag, 2005.

LI, H.; FU, M.; LU, J.; YANG, H. Ductile fracture: Experiments and computations. *International Journal of Plasticity*, Elsevier, v. 27, n. 2, p. 147–180, 2011.

LI, S. Hydrolytic degradation characteristics of aliphatic polyesters derived from lactic and glycolic acids. *Journal of Biomedical Materials Research*, Wiley-Blackwell, v. 48, n. 3, p. 342–353, 1999.

MALVERN, L. E. *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Englewood Cliffs, New Jersey Prentice-Hall, Inc., 1969.

MIEHE, C.; ROSATO, D.; KIEFER, B. Variational principles in dissipative electro-magneto-mechanics: A framework for the macro-modeling of functional materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 86, n. 10, p. 1225–1276, 2011.

MILLER, N.; WILLIAMS, D. The in vivo and in vitro degradation of poly(glycolic acid) suture material as a function of applied strain. *Biomaterials*, v. 5, n. 6, p. 365–368, 1984.

MOORE, J.; SOARES, J.; RAJAGOPAL, K. Biodegradable stents: Biomechanical modeling challenges and opportunities. *Cardiovascular Engineering and Technology*, Springer New York, v. 1, p. 52–65, 2010.

MOËS, N.; STOLZ, C.; BERNARD, P.-E.; CHEVAUGEON, N. A level set based model for damage growth: The thick level set approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley-Blackwell, v. 86, n. 3, p. 358–380, 2010.

MOSLER, J. Towards variational constitutive updates for finite strain plasticity models based on non-associative evolution equations. *PAMM*, WILEY-VCH Verlag, v. 9, n. 1, p. 321–322, 2009.

MOSLER, J. On variational updates for non-associative kinematic hardening of armstrong-frederick-type. *TECHNISCHE MECHANIK*, v. 30 (1-3), p. 244–251, 2010.

MOSLER, J. Variationally consistent modeling of finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 199, n. 45-48, p. 2753–2764, 2010.

MOSLER, J.; BRUHNS, O. Towards variational constitutive updates for non-associative plasticity models at finite strain: Models based on a volumetric-deviatoric split. *International Journal of Solids and Structures*, v. 46, n. 7-8, p. 1676–1684, 2009.

MOSLER, J.; BRUHNS, O. T. On the implementation of rate-independent standard dissipative solids at finite strain - variational constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 199, n. 9-12, p. 417–429, 2010.

MOSLER, J.; CIRAK, F. A variational formulation for finite deformation wrinkling analysis of inelastic membranes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 198, n. 27-29, p. 2087–2098, 2009.

MOSLER, J.; ORTIZ, M. Variational h-adaption in finite deformation elasticity and plasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 72, n. 5, p. 505–523, 2007.

MOSLER, J.; ORTIZ, M. An error-estimate-free and remapping-free variational mesh refinement and coarsening method for dissipative solids at finite strains. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 77, n. 3, p. 437–450, 2009.

MOTTA, A. C.; DUEK, E. A. R. Síntese e caracterização do copolímero poli (L-co-D, L ácido láctico). *Polímeros*, Scielo, v. 17, p. 123–129, 2007.

MULIANA, A.; RAJAGOPAL, K. Modeling the response of nonlinear viscoelastic biodegradable polymeric stents. *International Journal of Solids and Structures*, v. 49, n. 7-8, p. 989–1000, 2012.

MULIANA, A.; RAJAGOPAL, K.; SUBRAMANIAN, S. C. Degradation of an elastic composite cylinder due to the diffusion of a fluid. *Journal of Composite Materials*, SAGE Publications, v. 43, n. 11, p. 1225–1249, 2009.

MURAKAMI, S.; KAWAI, M.; RONG, H. Finite element analysis of creep crack growth by a local approach. *International Journal of Mechanical Sciences*, Elsevier, v. 30, n. 7, p. 491–502, 1988.

MURAKAMI, S.; LIU, Y. Mesh-dependence in local approach to creep fracture. *International Journal of Damage Mechanics*, SAGE Publications, v. 4, n. 3, p. 230–250, 1995.

NEEDLEMAN, A. Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 67, n. 1, p. 69–85, 1988.

NIAZI, M. S.; WISSELINK, H. H.; MEINDERS, T. Viscoplastic regularization of local damage models: revisited. *Computational Mechanics*, Springer Nature, v. 51, n. 2, p. 203–216, 2012.

ORTIZ, M.; STAINIER, L. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 171, n. 3-4, p. 419–444, 1999.

PARIS, P.; GOMEZ, M.; ANDERSON, W. A rational analytic theory of fatigue. *Trend Eng*, n. 13, p. 9–14, 1961.

PEERLINGS, R.; GEERS, M.; BORST, R. de; BREKELMANS, W. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier, v. 38, n. 44-45, p. 7723–7746, 2001.

PEREGO, G.; CELLA, G. D. Mechanical properties. In: AURAS, R.; LIM, L.-T.; SELKE, S. E. M.; TSUJI, H. (Ed.). *PLA Synthesis, Structures, Properties, Processing, and Applications*. Wiley-Blackwell, 2010. cap. 11, p. 141–153.

PIETRZAK, W. S.; SARVER, D. R.; VERSTYNEN, M. L. Bioabsorbable polymer science for the practicing surgeon. *The Journal of craniofacial surgery*, v. 8, p. 87–91, 1997.

RADOVITZKY, R.; ORTIZ, M. Error estimation and adaptive meshing in strongly nonlinear dynamic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 172, n. 1-4, p. 203–240, 1999.

RAJAGOPAL, K.; SRINIVASA, A.; WINEMAN, A. On the shear and bending of a degrading polymer beam. *International Journal of Plasticity*, v. 23, n. 9, p. 1618 – 1636, 2007.

RAJAGOPAL, K. R.; MULIANA, A. Shear deformation of a non-linear solid undergoing deterioration of material properties. *International Journal of Structural Changes in Solids*, v. 1, n. 1, p. 1–19, 2009.

ROESLER, C.; SALMORIA, G.; MORÉ, A.; VASSOLER, J.; FANCELLO, E. Torsion test method for mechanical characterization of PLDLA 70/30 ACL interference screws. *Polymer Testing*, Elsevier, v. 34, p. 34–41, 2014.

SANTAOJA, K.; TALJA, H. DOES THE GURSON-TVERGAARD MATERIAL MODEL SATISFY THE SECOND LAW OF THERMODYNAMICS? *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*, Walter de Gruyter GmbH, v. 11, n. 1-3, 2000.

SAYED, T. E.; MOTA, A.; FRATERNALI, F.; ORTIZ, M. A variational constitutive model for soft biological tissues. *Journal of Biomechanics*, v. 41, n. 7, p. 1458–1466, 2008.

SELKE, A. E. *Variational models of thermo-viscoelastic damage: Applications to polymer behavior and coupling with Thick Level Set approach to nonlocal dama*. Tese (Doutorado) — Ecole Centrale de Nantes, France, Universidade Federal de Santa Catarina, Brazil, 2016.

SIDDIQ, A.; ARCINIEGA, R.; SAYED, T. E. A variational void coalescence model for ductile metals. *Computational Mechanics*, Springer-Verlag, v. 49, n. 2, p. 185–195, 2012.

SIMO, J.; HUGHES, T. *Computational Inelasticity*. 1998.

SIMO, J.; JU, J. Strain- and stress-based continuum damage models I. Formulation II. Computational aspects. *International Journal of Solids and Structures*, v. 23, n. 7, p. 821–840 e 841–869, 1987.

SKRZYPEK, J. J.; GANCZARSKI, A. *Modeling of Material Damage and Failure of Structures*. Springer Berlin Heidelberg, 1999.

SOARES, J.; RAJAGOPAL, K.; MOORE, J. Deformation-induced hydrolysis of a degradable polymeric cylindrical annulus. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, Springer Berlin Heidelberg, v. 9, p. 177–186, 2010.

SOARES, J. S. *Constitutive Modeling of Biodegradable Polymers for Application in Endovascular Stents*. Tese (Doutorado) — Texas A&M University, 2008.

SOARES, J. S.; MOORE, J. E.; RAJAGOPAL, K. R. Theoretical modeling of cyclically loaded, biodegradable cylinders. In: MOLLICA, F.; PREZIOSI, L.; RAJAGOPAL, K. R. (Ed.). *Modeling of Biological Materials*. Boston, MA Birkhäuser Boston, 2007. p. 125–177.

SOARES, J. S.; MOORE, J. E. J.; RAJAGOPAL, K. R. Constitutive framework for biodegradable polymers with applications to biodegradable stents. *ASAIO Journal*, v. 54, n. 3, p. 295–301, 2008.

SOARES, J. S.; MOORE JAMES E., J. Biomechanical challenges to polymeric biodegradable stents. *Annals of Biomedical Engineering*, Springer, p. 1–20, 2015.

STAINIER, L. Consistent incremental approximation of dissipation pseudo-potentials in the variational formulation of thermo-mechanical constitutive updates. *Mechanics Research Communications*, v. 38, n. 4, p. 315–319, 2011.

STAINIER, L. Chapter Two - A Variational Approach to Modeling Coupled Thermo-Mechanical Nonlinear Dissipative Behaviors. In: BORDAS, S. P. A. (Ed.). Elsevier, 2013, (Advances in Applied Mechanics, v. 46). p. 69 – 126.

STAINIER, L.; ORTIZ, M. Study and validation of a variational theory of thermo-mechanical coupling in finite visco-plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, v. 47, n. 5, p. 705 – 715, 2010.

STOLZ, C.; MOËS, N. A new model of damage: a moving thick layer approach. *International Journal of Fracture*, Springer Nature, v. 174, n. 1, p. 49–60, 2012.

TVERGAARD, V. Effect of yield surface curvature and void nucleation on plastic flow localization. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 35, n. 1, p. 43 – 60, 1987.

VASSOLER, J. M.; REIPS, L.; FANCELLO, E. A. A variational framework for fiber-reinforced viscoelastic soft tissues. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 89, n. 13, p. 1691–1706, 2012.

VASSOLER, J. M.; STAINIER, L.; FANCELLO, E. A. A variational framework for fiber-reinforced viscoelastic soft tissues including damage. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd., p. 865–884, 2016.

VERT, M.; LI, S. M.; SPENLEHAUER, G.; GUERIN, P. Bioresorbability and biocompatibility of aliphatic polyesters. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, Springer Nature, v. 3, n. 6, p. 432–446, 1992.

VIEIRA, A.; MARQUES, A.; GUEDES, R.; TITA, V. Material model proposal for biodegradable materials. In: *11th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials*. 2011. v. 10, p. 1597–1602.

VIEIRA, A.; VIEIRA, J.; FERRA, J.; MAGALHÃES, F.; GUEDES, R.; MARQUES, A. Mechanical study of PLA-PCL fibers during in vitro degradation. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, v. 4, n. 3, p. 451–460, 2011.

VIEIRA, A. C.; GUEDES, R. M.; TITA, V. Constitutive models for biodegradable thermoplastic ropes for ligament repair. *Composite Structures*, v. 94, n. 11, p. 3149 – 3159, 2012.

VIEIRA, A. C.; GUEDES, R. M.; TITA, V. Constitutive modeling of biodegradable polymers: Hydrolytic degradation and time-dependent behavior. *International Journal of Solids and Structures*, v. 51, n. 5, p. 1164–1174, 2014.

WANG, Y.; PAN, J.; HAN, X.; SINKA, C.; DING, L. A phenomenological model for the degradation of biodegradable polymers. *Biomaterials*, v. 29, n. 23, p. 3393 – 3401, 2008.

WARD, I. M.; SWEENEY, J. *An Introduction to the Mechanical Properties of Solid Polymers*. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.

WEBER, G.; ANAND, L. Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic, hyperelastic-viscoplastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 79, n. 2, p. 173 – 202, 1990.

WEINBERG, K.; MOTA, A.; ORTIZ, M. A variational constitutive model for porous metal plasticity. *Computational Mechanics*, Springer-Verlag, v. 37, n. 2, p. 142–152, 2006.

YANG, Q.; STAINIER, L.; ORTIZ, M. A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 54, n. 2, p. 401 – 424, 2006.

ZHANG, Z. Explicit consistent tangent moduli with a return mapping algorithm for pressure-dependent elastoplasticity models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 121, p. 29–44, 1995.

ZHANG, Z. On the accuracies of numerical integration algorithms for Gurson-based pressure-dependent elastoplastic constitutive models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 121, p. 15–28, 1995.

APÊNDICE A – POTENCIAL INCREMENTAL

Dadas as definições (4.14), (4.15) e (4.16), o pseudo-potencial (4.18) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{P} = & \dot{W} + (1-d)\sigma_Y\dot{\alpha} + \frac{cf_A(\alpha)}{\eta+1}\left(\frac{\dot{\alpha}}{c}\right)^{\eta+1} \\ & + Y\dot{d}^p + \frac{R}{2(1-d)^n(Y+g)^{m-1}}(\dot{d}^h)^2 - g\dot{d}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Uma forma incremental equivalente de tal função pode ser aproximada por uma integral do tipo

$$\mathcal{W} = \Delta W + \Delta t \phi^* \simeq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{P} dt, \quad (\text{A.2})$$

que, ao considerarmos

$$\Delta W = (1-d_{n+1})\tilde{W}_{n+1} - (1-d_n)\tilde{W}_n, \quad Y_{n+1} \equiv \tilde{W}_{n+1} \text{ e } Y_n \equiv \tilde{W}_n,$$

toma a forma final

$$\begin{aligned} \mathcal{W} = & (1-d_{n+1})Y_{n+1} - (1-d_n)Y_n \\ & + \Delta t \left[(1-d_{n+1})\sigma_Y \left(\frac{\Delta\alpha}{\Delta t} \right) + \frac{cf_A(\alpha_{n+1})}{\eta+1} \left(\frac{\Delta\alpha/\Delta t}{c} \right)^{\eta+1} \right] \\ & + \Delta t \left[Y_{n+1} \frac{\Delta d^p}{\Delta t} \right] \\ & + \Delta t \left[\frac{R}{2(1-d_{n+\theta})^n(Y_{n+\gamma}+g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 - g \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Deve-se notar que algumas das variáveis de estado na função de dissipação foram escolhidas de forma que essas possuam valores implícitos (i.e. $Y_{n+1}, \alpha_{n+1}, d_{n+1}$), enquanto outras assumem valores intermediários dentro do intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$. A variável $Y_{n+\gamma}$ no último termo de (A.3) é definida por meio de uma função linearizada

$$Y_{n+\gamma} = \gamma Y_{n+1} + (1-\gamma)Y_n, \quad \gamma \in [0, 1], \quad (\text{A.4})$$

enquanto o dano total $d_{n+\theta}$ é definido pela expressão

$$d_{n+\theta} = d_n + \theta \left(\Delta \alpha \frac{(Y_{n+\theta})^S}{N} + \Delta d^h \right), \quad \theta \in [0, 1], \quad (\text{A.5})$$

com $Y_{n+\theta}$ seguindo (A.4) com o parâmetro $\theta \in [0, 1]$.

Como já mencionado, a escolha desses valores intermediários e suas correspondentes aproximações podem ser consideradas como questão referente ao modelamento e conveniência numérica. Uma análise de sensibilidade foi executada para os parâmetros θ e γ por meio de experimentos numéricos.

APÊNDICE B – ESTACIONARIEDADE: DIREÇÃO

O problema de minimização (4.19) deve satisfazer as restrições (4.11) impostas à \mathbf{M} . Desta forma, as condições de otimalidade em relação a essa variável interna são estabelecidas por meio de uma função Lagrangiana

$$\mathcal{L} = \mathcal{P} + \lambda_1(\mathbf{M} : \mathbf{I}) + \lambda_2(\mathbf{M} : \mathbf{M}^{-3/2}), \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_1} \delta \lambda_1 = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_2} \delta \lambda_2 = 0. \quad (\text{B.2})$$

Empregando a primeira condição $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = 0$, escolhendo $\delta \mathbf{M} = \mathbf{I}$ e $\delta \mathbf{M} = \mathbf{M}$, os multiplicadores de Lagrange ficam definidos por

$$\lambda_1 = \frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \mathbf{I}, \quad \lambda_2 = \frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \mathbf{M}. \quad (\text{B.3})$$

Substituindo (B.3) em (B.2-a) resulta em

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} + \left[\left(\frac{1}{3} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \mathbf{I} \right) \mathbf{I} + \left(\frac{2}{3} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \mathbf{M} \right) \mathbf{M} \right] : \delta \mathbf{M} = 0. \quad (\text{B.4})$$

A fim de se avaliar $\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M}$, toma-se a taxa da energia livre de Helmholtz escrita na forma

$$\dot{W} = (1-d) \left[\tilde{\mathbf{P}} : \dot{\mathbf{F}} + \tilde{\chi} : \dot{\mathbf{F}}^p + \tilde{\kappa} \dot{\alpha} \right] - Y \dot{d}^p - Y \dot{d}^h, \quad (\text{B.5})$$

sendo

$$\tilde{\chi} = \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{F}^p} = -\mathbf{C}^e \mathbf{S}^e \mathbf{F}^{p-T} = -\tilde{\Sigma}^e \mathbf{F}^{p-T}, \quad (\text{B.6})$$

e $\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{D}^p \mathbf{F}^p$, $\mathbf{D}^p = \dot{\alpha} \mathbf{M}$.

Após algumas operações algébricas, tem-se que

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = -(1-d) \left[\dot{\alpha} \mathbf{I} \left(\tilde{\Sigma}^e \mathbf{F}^{p-T} \right) \mathbf{F}^{p-T} \right] : \mathbb{I}_s : \delta \mathbf{M} = -(1-d) \dot{\alpha} \tilde{\Sigma}^e : \delta \mathbf{M}, \quad (\text{B.7})$$

na qual \mathbb{I}_s é um tensor identidade simétrico de quarta ordem. Substituindo esse resultado em (B.4) e operando os termos, chega-se a

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{M}} = -\tilde{\Sigma}_d^e + \frac{2}{3} \left(\tilde{\Sigma}_d^e : \mathbf{M} \right) \mathbf{M} = 0 \text{ e } \mathbf{M} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\tilde{\Sigma}_d^e}{\|\tilde{\Sigma}_d^e\|}, \quad (\text{B.8})$$

sendo $\tilde{\Sigma}_d^e$ o tensor desviador de Mandel efetivo.

O problema incremental é então tratado de forma análoga. Nesse caso, considera-se a função Lagrangiana incremental

$$\mathcal{L}_\Delta = \mathcal{W} + \lambda_1(\mathbf{M} : \mathbf{I}) + \lambda_2(\mathbf{M} : \mathbf{M} - 3/2), \quad (\text{B.9})$$

$$\mathcal{W} = (1 - d_{n+1})Y_{n+1} - (1 - d_n)Y_n + \Delta t \phi^*. \quad (\text{B.10})$$

Ao avaliarmos o primeiro termo da condição de estacionariedade $\frac{\partial \mathcal{L}_\Delta}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = 0$, esse nos leva a

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = \frac{\partial (1 - d_{n+1})Y_{n+1}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} + \Delta t \frac{\partial \phi^*}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M}, \quad (\text{B.11})$$

que após extensiva sequência de operações, pode ser escrita em uma forma compacta como

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M} = \mathbf{K} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{M}} : \delta \mathbf{M}, \quad (\text{B.12})$$

para a qual \mathbf{K} é um escalar. Aplicando então o mesmo procedimento apresentado anteriormente, isso resulta em

$$\lambda_1 = \frac{1}{3} \mathbf{K} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{M}} : \mathbf{I}, \quad \lambda_2 = \frac{1}{3} \mathbf{K} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{M}} : \mathbf{M}. \quad (\text{B.13})$$

A fim de se avaliar $\frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{M}}$, a parcela isocórica da energia livre W_{n+1}^e é considerada aqui como uma função no formato de um potencial de Hencky

$$W_{n+1}^e = \frac{1}{2} \mathcal{E}_{n+1}^e : \mathbb{D} : \mathcal{E}_{n+1}^e, \quad (\text{B.14})$$

no qual $\hat{\mathcal{E}}_{n+1}^e = \hat{\mathcal{E}}_{n+1}^{pr} - \Delta \alpha \mathbf{M}$ é a contribuição isocórica da deformação logarítmica. Assim,

$$\frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{M}} = \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \mathbf{M}} = -\Delta \alpha \tilde{\Sigma}_{d\ n+1}^e, \quad (\text{B.15})$$

na qual $\tilde{\Sigma}_{d\ n+1} = \tilde{\Sigma}_{d\ n+1}^{pr} - 2\mu \Delta \alpha \mathbf{M}$, $\tilde{\Sigma}_{d\ n+1}^{pr} = 2\mu \hat{\mathcal{E}}_{n+1}^{pr}$ definem o tensor de Mandel isocórico elástico e μ é o módulo cisalhante do material. Substituindo

(B.15) em (B.12), obtém-se finalmente um forma explícita para \mathbf{M} , isto é,

$$\frac{\partial \mathcal{L}_\Delta}{\partial \mathbf{M}} = -\tilde{\Sigma}_{d \ n+1} + \frac{2}{3} [\tilde{\Sigma}_{d \ n+1} : \mathbf{M}] \mathbf{M} = 0, \quad \mathbf{M} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}}{\|\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}\|}. \quad (\text{B.16})$$

Adicionalmente, como consequência da escolha de um potencial tipo Hencky, a substituição de \mathbf{M} na definição do tensor de tensões de Mandel isocórico $\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}$ deixa evidente que $\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}$ e $\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}^{pr}$ são colineares, tornando possível o cálculo de \mathbf{M} em termos de tensores preditores, isto é,

$$\mathbf{M} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}^{pr}}{\|\tilde{\Sigma}_{d \ n+1}^{pr}\|} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}}{\|\hat{\mathbf{C}}_{n+1}^{pr}\|}. \quad (\text{B.17})$$

APÊNDICE C – ESTACIONARIEDADE: DEFORMAÇÃO ACUMULADA

A condição de estacionariedade de \mathcal{P} em relação à variável $\dot{\alpha}$ pode ser avaliada de forma direta por meio de

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\alpha}} \delta \dot{\alpha} = \left[\frac{\partial \dot{W}}{\partial \dot{\alpha}} + \frac{\partial}{\partial \dot{\alpha}} \left((1-d)\sigma_Y \dot{\alpha} + \frac{c f_A(\alpha)}{\eta+1} \left(\frac{\dot{\alpha}}{c} \right)^{\eta+1} \right) + Y \frac{\partial \dot{p}}{\partial \dot{\alpha}} \right] \delta \dot{\alpha} = 0 . \quad (\text{C.1})$$

Considerando a taxa da energia livre de Helmholtz e a condição (B.7), isso permite que (C.1) seja expressa como

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \dot{\alpha}} = (1-d) \left[\tilde{\chi} : \frac{\partial \dot{\mathbf{F}}^p}{\partial \dot{\alpha}} + \tilde{\kappa} + \sigma_Y \right] + f_A(\alpha) \left(\frac{\dot{\alpha}}{c} \right)^\eta \quad (\text{C.2})$$

$$= (1-d) \left[(\sigma_Y + \tilde{\kappa}) - \tilde{\Sigma}_{eq} \right] + f_A(\alpha) \left(\frac{\dot{\alpha}}{c} \right)^\eta = 0 , \quad (\text{C.3})$$

na qual $\tilde{\Sigma}_{eq} = \tilde{\Sigma}^e : \mathbf{M}$ é uma tensão efetiva do tipo von Mises.

Embora tal derivação seja relativamente simples para a formulação no contínuo, o procedimento torna-se um tanto mais elaborado quando se considera o caso incremental equivalente. Tal fato decorre do acoplamento produzido pela variável discreta $\Delta\alpha$ no potencial incremental. A condição de estacionariedade de \mathcal{W} em relação à variável $\Delta\alpha$ é escrita como

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta\alpha} \delta \Delta\alpha = \left[(1-d_{n+1}) \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta\alpha} - Y_{n+1} \frac{\partial d_{n+1}^p}{\partial \Delta\alpha} + \Delta t \frac{\partial \bar{\phi}^*}{\partial \Delta\alpha} \right] \delta \Delta\alpha = 0 . \quad (\text{C.4})$$

Em (C.4), os termos relacionados com as funções de dissipação são representados por

$$\Delta t \frac{\partial \phi^*}{\partial \Delta\alpha} = \Delta t \frac{\partial \psi_{vp}^*}{\partial \Delta\alpha} + \Delta t \frac{\partial \varphi_{dp}^*}{\partial \Delta\alpha} + \Delta t \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial \Delta\alpha} , \quad (\text{C.5})$$

cujas expressões à direita da equação é composta pelas contribuições viscoplástica, aquela devido ao dano dúctil e por último aquela relacionada ao dano hidrolítico, sendo cada uma delas respectivamente descritas por

$$\Delta t \frac{\partial \psi_{vp}^*}{\partial \Delta \alpha} = (1 - d_{n+1}) \sigma_Y + f_A(\alpha_{n+1}) \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^\eta + \Delta t \left[\frac{c}{\eta + 1} \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^{\eta+1} \frac{\partial f_A(\alpha_{n+1})}{\partial \Delta \alpha} - \sigma_Y \left(\frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \right) \frac{\partial d_{n+1}^p}{\partial \Delta \alpha} \right], \quad (C.6)$$

$$\Delta t \frac{\partial \varphi_{dp}^*}{\partial \Delta \alpha} = \Delta t \frac{Y_{n+1}^{S+1}}{N} \frac{1}{\Delta t} + \Delta t \frac{\Delta \alpha}{\Delta t} (S + 1) \frac{Y_{n+1}^S}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha}, \quad (C.7)$$

$$\Delta t \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial \Delta \alpha} = \Delta t \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \left[\frac{\gamma \frac{1-m}{(1-d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha}}{n \frac{\partial d_{n+\theta}^p}{\partial \Delta \alpha}} + \frac{\partial d_{n+\theta}^p}{\partial \Delta \alpha} \right]. \quad (C.8)$$

Finalmente, partindo da definição (A.5) para $d_{n+\theta}$ bem como das derivadas parciais do dano dúctil em relação à $\Delta \alpha$

$$\frac{\partial d_{n+\theta}^p}{\partial \Delta \alpha} = \theta \left(\frac{Y_{n+\theta}^S}{N} + \theta S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right), \quad \theta \in [0, 1], \quad (C.9)$$

a condição (C.4) é então escrita em forma compacta como

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta \alpha} = \mathcal{G} \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \Delta \alpha} + A + \Delta t B = 0, \quad (C.10)$$

sendo \mathcal{G} , A e B respectivamente definidas em (4.43), (4.44) e (4.45).

APÊNDICE D – ESTACIONARIEDADE: DANO HIDROLÍTICO

A condição de estacionariedade de \mathcal{P} com relação a d^h resulta em

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial d^h} \delta d^h = \left[\frac{\partial \dot{W}}{\partial d^h} + \frac{\partial}{\partial d^h} \left(\frac{R}{2(1-d^h)^n (Y+g)^{m-1}} d^{h^2} - g d^h \right) \right] \delta d^h = 0, \quad (\text{D.1})$$

que, uma vez que seus termos tenham sido rearranjados, fornece a equação para evolução do dano hidrolítico (4.26), repetida aqui por conveniência

$$d^h = (1-d)^n \frac{(Y+g)^m}{R}. \quad (\text{D.2})$$

Novamente, ressalta-se que para o caso incremental as operações não são tão diretas devido ao acoplamento produzido pela variável incremental Δd^h em \mathcal{W} (expressões (4.28) e (4.30)), assim

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta d^h} \delta \Delta d^h = \left[\frac{\partial}{\partial \Delta d^h} [(1-d_{n+1}) Y_{n+1}] + \Delta t \left(\frac{\partial \psi_{vp}^*}{\partial \Delta d^h} + \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial \Delta d^h} \right) \right] \delta \Delta d^h \quad (\text{D.3})$$

$$= -Y_{n+1} - \Delta t \sigma_Y \left(\frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \right) + \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial d^h} + \theta \Delta t \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial d_{n+\theta}^h} = 0, \quad (\text{D.4})$$

sendo

$$\frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial d^h} = \frac{R}{(1-d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} - g, \quad (\text{D.5})$$

$$\frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial d_{n+\theta}^h} = \frac{n}{2(1-d_{n+\theta})^{n+1}} \frac{R}{(Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2. \quad (\text{D.6})$$

Finalmente, substituindo (D.5) e (D.6) em (D.4) fornece

$$\begin{aligned}
 r_2 = \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Delta d^h} = & -(Y_{n+1} + g) + \frac{R}{(1 - d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \\
 & + \Delta t \left[\theta \frac{nR}{2(1 - d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 - \sigma_Y \left(\frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \right) \right] = 0 .
 \end{aligned}
 \tag{D.7}$$

APÊNDICE E – SEGUNDO TENSOR DE TENSÃO DE PIOLA-KIRCHHOFF

A atualização da tensão descrita em termos do segundo tensor de Piola-Kirchhoff pode ser avaliada considerando (4.46), isto é,

$$\mathbf{S}_{n+1} = 2 \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{E.1})$$

na qual

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = (1 - d_{n+1}) \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} - Y_{n+1} \frac{\partial d_{n+1}^p}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \phi^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{E.2})$$

e

$$\Delta t \frac{\partial \phi^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \Delta t \frac{\partial \psi_{vp}^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \varphi_{dp}^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} + \Delta t \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}. \quad (\text{E.3})$$

Cada termo de (E.3) é respectivamente dado por

$$\Delta t \frac{\partial \psi_{vp}^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = -\Delta t \sigma_Y \left(\frac{\Delta \alpha}{\Delta t} \right) \frac{\partial d_{n+1}^p}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{E.4})$$

$$\Delta t \frac{\partial \varphi_{dp}^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \Delta t \frac{\Delta \alpha}{\Delta t} (S + 1) \frac{Y_{n+1}^S}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{E.5})$$

e

$$\Delta t \frac{\partial \varphi_{dh}^*}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \Delta t \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \left[\begin{aligned} & \theta \frac{n}{(1 - d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \theta S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \\ & + \gamma \frac{1 - m}{(1 - d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \end{aligned} \right]. \quad (\text{E.6})$$

Substituindo (E.4), (E.5), (E.6) em (E.3) e em seguida (E.3) em (E.2), segue que o segundo tensor de Piola-Kirchhoff assume a forma da expressão final em (4.46), isto é,

$$\mathbf{S}_{n+1} = 2 \frac{\partial \bar{\mathcal{W}}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \equiv 2 \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \mathcal{G} \tilde{\mathbf{S}}_{n+1}. \quad (\text{E.7})$$

APÊNDICE F – SEGUNDA DERIVADA DO POTENCIAL INCREMENTAL

Além da primeira condição de estacionariedade do potencial incremental (4.28), a informação sobre a segunda derivada parcial poderá ser útil, por exemplo, na solução do sistema local de equações do modelo constitutivo, ou ainda na solução global de equilíbrio para o método de elementos finitos. Sendo assim, apresenta-se aqui de forma sucinta os principais resultados da segunda derivada do potencial em relação as variáveis incrementais do modelo $\Delta\alpha$ e Δd^h . Desta forma, a partir da Equações (4.41) e (4.42), repetidas abaixo por conveniência,

$$r_1 = \mathcal{G} \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \Delta\alpha} + A + \Delta t B = 0$$

$$r_2 = -(Y_{n+1} + g) + \frac{R}{(1 - d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} + \Delta t \left[\theta \frac{nR}{2(1 - d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 - \sigma_Y \left(\frac{\Delta\alpha}{\Delta t} \right) \right] = 0$$

busca-se então as respectivas expressões para

$$\mathbb{K}_{11} = \frac{\partial r_1}{\partial \Delta\alpha}, \quad \mathbb{K}_{12} = \frac{\partial r_1}{\partial \Delta d^h}, \quad \mathbb{K}_{21} = \frac{\partial r_2}{\partial \Delta\alpha}, \quad \mathbb{K}_{22} = \frac{\partial r_2}{\partial \Delta d^h}. \quad (\text{F.1})$$

Expressão para \mathbb{K}_{11}

$$\mathbb{K}_{11} = \mathcal{G} \frac{\partial}{\partial \Delta\alpha} \left(\frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \Delta\alpha} \right) + \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \Delta\alpha} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta\alpha} + \frac{\partial A}{\partial \Delta\alpha} + \Delta t \frac{\partial B}{\partial \Delta\alpha} \quad (\text{F.2})$$

na qual

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta \alpha} = & -\sigma_Y S \left(2\Delta \alpha \frac{Y_{n+1}^{S-1}}{N} + \Delta \alpha^2 (S-1) \frac{Y_{n+1}^{S-2}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right) \\
& + \Delta t (1-m) \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \gamma \left[-\gamma \frac{m}{(1-d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m+1}} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \Delta t (1-m) \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \gamma \left[\theta \frac{n}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{Y_{n+\theta}^S}{N} \right] \\
& + \Delta t (1-m) \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \gamma \left[\theta \frac{n}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^m} \theta S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \Delta t n \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{S}{N} \left[\frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \right] \\
& + \Delta t n \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{S}{N} \left[\theta \frac{\Delta \alpha (S-1) Y_{n+\theta}^{S-2}}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \Delta t n \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{S}{N} \left[\gamma \frac{(1-m) \Delta \alpha Y_{n+\theta}^{S-1}}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \Delta t n \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{S}{N} \left[\theta \frac{(n+1) \Delta \alpha Y_{n+\theta}^{S-1}}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^S}{N} \right] \\
& + \Delta t n \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{S}{N} \left[\theta^2 \frac{(n+1) \Delta \alpha^2 S Y_{n+\theta}^{S-1}}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right],
\end{aligned} \tag{F.3}$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \Delta \alpha} = \mathcal{G} \frac{\partial \kappa}{\partial \Delta \alpha} + \kappa \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta \alpha} - \sigma_Y \frac{\partial d_{n+1}^p}{\partial \Delta \alpha} + f_A(\alpha_{n+1}) \frac{\eta}{c \Delta t} \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^{\eta-1} + \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^\eta \frac{\partial f_A(\alpha_{n+1})}{\partial \Delta \alpha} \tag{F.4}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \Delta \alpha} = & \frac{c}{\eta+1} \frac{\partial f_A(\alpha_{n+1})}{\partial \Delta \alpha} \frac{(\eta+1)}{c \Delta t} \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^\eta + \frac{c}{\eta+1} \left(\frac{\Delta \alpha / \Delta t}{c} \right)^{\eta+1} \frac{\partial^2 f_A(\alpha_{n+1})}{\partial \Delta \alpha^2} \\
& - \frac{\sigma_Y}{\Delta t} \left[\frac{Y_{n+1}^S}{N} + \Delta \alpha S \frac{Y_{n+1}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \frac{n\theta}{N} \left[\theta \frac{S Y_{n+\theta}^{S-1}}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \frac{n\theta}{N} \left[\gamma \frac{(1-m) Y_{n+\theta}^S}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right] \\
& + \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \frac{n\theta}{N} \left[\theta \frac{(n+1) Y_{n+\theta}^S}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^S}{N} \right] \\
& + \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \frac{n\theta}{N} \left[\theta^2 \frac{(n+1) \Delta \alpha S Y_{n+\theta}^S}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right].
\end{aligned} \tag{F.5}$$

Expressão para \mathbb{K}_{12}

$$\mathbb{K}_{12} = \frac{\partial W_{n+1}^e}{\partial \Delta \alpha} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta d^h} + \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \Delta d^h} + \Delta t \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \Delta d^h} \tag{F.6}$$

sendo que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta d^h} = & -1 + R \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \gamma \frac{(1-m)}{(1-d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^m} \\
& + R \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \theta^2 \frac{n}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \\
& + \Delta t \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \gamma \theta \frac{n(1-m)}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^m} \\
& + \Delta t \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^3 \frac{n(n+1)}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N},
\end{aligned} \tag{F.7}$$

$$\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial \Delta d^h} = \kappa \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Delta d^h} - \sigma_Y \quad (\text{F.8})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{B}}{\partial \Delta d^h} &= \frac{1}{\Delta t} \theta \frac{nR}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^S}{N} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \\ &+ \frac{R}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta^2 \frac{n(n+1)}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{Y_{n+\theta}^S}{N} \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

Expressão para \mathbb{K}_{21}

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{21} &= \frac{\partial r_2}{\partial \Delta \alpha} = -\frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} + \frac{\partial}{\partial \Delta \alpha} \left[\frac{R}{(1-d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right] \\ &+ \theta \Delta t \frac{\partial}{\partial \Delta \alpha} \left[\frac{nR}{2(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \right] - \sigma_Y \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{21} &= - \left(\frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} + \sigma_Y \right) \\ &+ R \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \gamma \frac{1-m}{(1-d_{n+\theta})^n (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \\ &+ R \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \theta \frac{n}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{Y_{n+\theta}^S}{N} + \theta S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right) \\ &+ \theta \Delta t \frac{nR}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \theta \frac{n+1}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} (Y_{n+\gamma} + g)^{m-1}} \left(\frac{Y_{n+\theta}^S}{N} + \theta S \Delta \alpha \frac{Y_{n+\theta}^{S-1}}{N} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \right) \\ &+ \theta \Delta t \frac{nR}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \gamma \frac{1-m}{(1-d_{n+\theta})^{n+1} (Y_{n+\gamma} + g)^m} \frac{\partial Y_{n+1}}{\partial \Delta \alpha} \end{aligned} \quad (\text{F.11})$$

Expressão para \mathbb{K}_{22}

$$\begin{aligned}\mathbb{K}_{22} &= \frac{\partial r_2}{\partial \Delta d^h} = \frac{1}{\Delta t} \frac{R}{\left(Y_{n+\gamma} + g\right)^{m-1}} \left[\frac{1}{(1-d_{n+\theta})^n} + \theta \Delta d^h \frac{n}{(1-d_{n+\theta})^{n+1}} \right] \\ &\quad + \theta \Delta t \frac{1}{\Delta t^2} \frac{nR}{2\left(Y_{n+\gamma} + g\right)^{m-1}} \left[2 \frac{\Delta d^h}{(1-d_{n+\theta})^{n+1}} + \theta \Delta d^h{}^2 \frac{n+1}{(1-d_{n+\theta})^{n+2}} \right]\end{aligned}\tag{F.12}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{K}_{22} &= \frac{R}{(1-d_{n+\theta})^n \left(Y_{n+\gamma} + g\right)^{m-1}} \left[\frac{1}{\Delta t} + \theta \frac{n}{(1-d_{n+\theta})} \frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right] \\ &\quad + \theta \frac{nR}{(1-d_{n+\theta})^{n+2} \left(Y_{n+\gamma} + g\right)^{m-1}} \left[(1-d_{n+\theta}) \frac{\Delta d^h}{\Delta t} + \theta \Delta t \frac{(n+1)}{2} \left(\frac{\Delta d^h}{\Delta t} \right)^2 \right]\end{aligned}\tag{F.13}$$

